1970

D. Kolb

Projektion spurioser Rotationszustände aus Vielteilchenwellenfunktionen des axial-symmetrisch deformierten Schalenmodells

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

vorgelegt von
Dietmar Kolb
aus Karlsbad/ČSSR

Frankfurt am Main, 1970

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Frankfurt am Main

Dekan:	Prof. Dr. G. Schneider
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. W. Greiner
Erstgutachter:	Prof. Dr. W. Greiner
Zweitgutachter:	Prof. Dr. P. Fulde

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juli 1970

Inhaltsverzeichnis

Abstract

A method is presented to project out spurious states from many particle wave functions of an axial-symmetric potential. It is shown that the spurious center of mass and the spurious rotational motions can be treated equally for arbitrary single particle potentials. However, their behaviour with respect to the particle number A is very different. Using the Nilsson model, a spectrum of 0^+ states of Ne^{20} is calculated, from which the spurious rotations are projected out. An excellent agreement with the experimental spectrum is obtained.

Einleitung

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Verfahren hergeleitet und diskutiert, das es gestattet, spuriose Rotationsanteile aus Vielteilchenzuständen eines Schalenmodellhamiltonoperators herauszuprojizieren, so daß man nicht nur zu richtigen Anregungsenergien sondern auch zu Wellenfunktionen gelangt, die es ermöglichen, realistische Übergangswahrscheinlichkeiten von Operatoren (z.B. Quadrupoloperator) im körperfesten Koordinatensystem, also innere Eigenschaften des Vielteilchensystems, zu berechnen.

Die Notwendigkeit, ein solches Projektionsverfahren überhaupt auszuarbeiten, ergibt sich aus einer einfachen seit langem bekannten Tatsache: Es ist nicht einmal mehr exakt möglich, das quantenmechanische 3-Körperproblem zu lösen, und auch die näherungsweise numerische mikroskopische Behandlung ist nicht sehr genau möglich. Dazu kommt in der Kernphysik das Problem, daß die Nukleon-Nukleon-Kräfte nur ungenügend bekannt sind, und es deshalb ohnehin nicht möglich wäre, sehr präzise Aussagen zu machen. Bei komplizierteren Vielteilchensystemen hat sich die Clusterbeschreibung [1)] bewährt, falls die zwischen den Teilchen wirkenden Kräfte solche größere Konfigurationen, Substrukturen, erzeugen. Bei mehr als 20 Teilchen enden diese Beschreibungsmöglichkeiten in der Kernphysik allmählich, und man ist auf halbphänomenologische Modelle, Kollektiv- und Schalenmodell [2)] angewiesen. Da man in vielen Bereichen der Physik mit solchen Modellen arbeiten muß, treten stets ähnliche Schwierigkeiten auf. Die vorliegende Arbeit ist deshalb so allgemein gehalten, daß sie in allen wichtigen Passagen auch auf nichtkernphysikalische Probleme anwendbar ist.

Die Beschreibung eines Vielteilchensystems durch ein Schalenmodell besagt, daß die Wechselwirkung der Teilchen untereinander gerade so beschaffen ist, daß die Bewegung eines Teilchens so geschieht, als bewege es sich in einem mittleren Potential, das von allen anderen (A-1) Teilchen erzeugt wird. Auf die Problematik dieses Vorgehens wird in (I.1) näher eingegangen und dann in den folgenden

Kapiteln aufgezeigt, wie man die durch den Schalenmodellansatz erzeugten spuriosen, d.h. nichtphysikalischen Bewegungen wieder herausprojiziert.

Die Arbeit beschäftigt sich insbesondere mit dem wichtigen Spezialfall axialsymmetrisch deformierter Gestalten des Vielteilchensystems und damit auch des beschreibenden Potentials. Die Komplikationen werden deutlich, wenn man mit der früheren Arbeit von W. Scheid [3)] vergleicht, der den Fall der dreiachsig deformierten Gestalten beschrieb.

Es ergaben sich überraschende Ergebnisse mittels des in den Kapiteln I und II beschriebenen Projektionsverfahrens. Vor allem zeigte sich ein fundamentaler qualitativer Unterschied im Verhalten der Schwerpunkts- und der Rotationsspuriositäten. Während die spuriosen Schwerpunktsanteile in der Vielteilchenwellenfunktion, dargestellt durch Mehrteilchen - Mehrlochanregungen des Schalenmodells, wie erwartet, mit wachsender Massenzahl unbedeutender werden, wachsen die Rotationsspuriositäten an, demonstriert am Nilsson Modell als Schalenmodellansatz. Um sich überhaupt eine Vorstellung von der Größe des Effekts zu machen, werden die spuriosen Rotationskorrekturen im Kapitel IV am leichten Ne^{20} und dem mittelschweren Yb^{168} ausgerechnet.

Sehr wertvolle Aufschlüsse über die Struktur der Vielteilchenwellenfunktionen des Nilsson Modells finden sich im Kapitel III, wo auch, wie an verschiedenen Stellen von (I.4, Kapitel IV), die Problematik notwendiger Näherungen diskutiert wird, und es wird auch deutlich, daß gewisse exakte Aussagen gefolgert werden können, die schließlich zur Auflösung vieler ursprünglicher Widersprüche führten.

Ein, wie ich meine, großer Erfolg dieses Projektionsverfahrens wird zusammen mit der Diskussion einiger konkreter Computerprobleme in Abschnitt IV.4 angegeben. Es gelingt, das 0^+-Anregungsspektrum des Ne^{20}, soweit es experimentell bekannt ist, ohne weiteres, nur unter Benutzung des Nilssonmodells und des Projektionsverfahrens ohne neue Parameter oder eine Restwechselwirkung einzuführen oder gar

anzupassen, in hervorragender Weise zu reproduzieren. Sowohl die zunächst falsche Anzahl wie unrichtige Lage des Niveaus wird durch Anwendung des Projektionsverfahrens richtig gestellt.

Viele andere Eigenschaften der Niederenergiekernphysik lassen sich zwanglos verstehen (IV.2, IV.3), so daß man den vorsichtigen Optimismus äußern kann, daß man in dem dargestellten Verfahren zusammen mit dem Schalenmodell ein Instrument besitzt, deformierte Vielteilchensysteme so brauchbar zu beschreiben, wie das bei den sphärischen (z.B. sphärische magische Kerne) durch das Schalenmodell alleine möglich ist.

I. Die Projektion spurioser Zustände

Die folgenden Überlegungen sollen sich auf die Beschreibung deformierter nicht relativistischer quantenmechanischer Vielteilchensysteme beziehen. Nehmen wir das Oszillatorpotential. Es ist das einzige bekannte Potential, bei dem die exakte Abspaltung eines Schwerpunktsanteils gelingt $H_{os} = H_{intr} + H_{CM}$. Im Falle des Nilssonmodells [5]

$$H_{Nils} = H_{os} + C\,\vec{l}\cdot\vec{s} + D\vec{l}^{\,2} \approx H_{intr} + H_{CM} \tag{1}$$

(H_{intr} ist der Hamiltonoperator der inneren Bewegung)

gelingt dies wegen der Kleinheit der Korrekturen noch annäherungsweise, d.h. der auftretende Kopplungsterm ist klein und bei schweren Kernen vernachlässigbar. Eine auch nur annäherungsweise gute Abspaltung eines Rotationsanteils gelingt aber in beiden Fällen nicht mehr, da insbesondere die kinetische Energie nicht in einen intrinsischen und einen Rotationsanteil zerfällt, sondern ein starker Kopplungsterm auftritt. (Zur Asymptotik großer und verschwindender Deformation siehe I.4).

$$H_N = H_{intr} + H_{rot} + H_{CM} + H_{koppl}. \tag{2}$$

Daraus erkennt man, daß bei den Rotationen in jedem Falle, bei der Schwerpunktsbewegung in allgemeineren Potentialen ein Formalismus gefunden werden muß, den Kopplungsterm zu behandeln, so daß durch Umkehrung der Gleichung der intrinsische Anteil erhalten wird.

$$H_{intr} = H - H_{rot} - H_{CM} - H_{koppl} \tag{3}$$

Hierbei sei mit H ein beliebiger, das physikalische System beschreibender Hamiltonoperator bezeichnet.

Die Lösung des Problems geschieht mittels einer Koordinatentransformation vom Laborsystem in das körperfeste Koordinatensystem, wobei dann für H_{intr} ein Schalenmodellansatz H_S gemacht wird. Die

dadurch auftretenden spuriosen Bewegungen bekommt man in den Griff, wenn es gelingt, H_{intr} aus H_S näherungsweise zu berechnen.

I.1 Die allgemeine Methode als Koordinatentransformation

Um Konfusionen zu vermeiden, sei eine kurze Vorbemerkung gemacht. Ziel ist die Beschreibung unseres pyhsikalischen Vielteilchenproblems durch geeignete Modellvorstellungen. Wir spalten den Hamiltonoperator auf in Anteile, die die kollektive Bewegung des Vielteilchensystems beschreiben und solche, die die verbleibende intrinsische Bewegung der Teilchen bestimmen.

$$H = \sum_{i=1}^{A} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + \sum_{i<k} V(\vec{r}_i - \vec{r}_k) = H_{intr} + T_{CM} + T_{rot} \tag{4}$$

mit

$$H_{intr} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} - T_{CM} - T_{rot} + \sum_{i<k} V(\vec{r}_i - \vec{r}_k)$$

$$T_{CM} = \frac{\vec{P}^{\,2}}{2AM} \qquad \vec{P} = \sum_{i=1}^{A} \vec{p}_i \qquad m_i = M \quad (i=1;A)$$

$$T_{rot} = \sum_{\alpha=1,2,3} \frac{(I_\alpha - J_\alpha')^2}{2\Theta_\alpha} \qquad J_\alpha' = \sum_i j_{i\alpha}$$

Wobei I der Gesamtdrehimpuls des Systems bezogen auf die körperfesten Achsen, J' der Drehimpuls der inneren Bewegung im inneren System und Θ_α das gesamte Trägheitsmoment bezüglich der α -ten intrinsischen Achse ist. Da T_{rot} nur im intrinsischen Koordinatensystem gegeben ist, man andererseits H im Laborsystem ansetzte, ist es notwendig, T_{rot} ins Laborsystem zu transformieren, was bei Kenntnis der J_α' , Θ_α mittels einer Drehung möglich ist. Das ganze Problem reduziert sich darauf, für H_{intr} ein geeignetes Modell zu finden. Man sieht leicht ein, daß es nicht möglich sein wird, einen translations- und rotationsinvarianten Ausdruck zu finden,

denn dies setzte voraus, daß man T_{intr} berechnen kann, was jedoch erst nach Lösung des Problems wirklich möglich ist.

$$T_{intr} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} - T_{CM} - T_{rot} \tag{5}$$

Man wählt daher einen anderen Weg und setzt

$$H_{intr} \approx \sum_i T_i + \sum_{i<k} V(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \tag{6}$$

Es ist offensichtlich, daß man damit T_{CM} und T_{rot} doppelt gezählt hat und der so entstandene Hamiltonoperator nicht mehr dem ursprünglichen entspricht. Die Rechtfertigung für dieses Vorgehen liegt in der Adiabasieannahme, die besagt, daß die kollektive und die intrinsische Bewegung nicht oder nur schwach miteinander gekoppelt sind (strong coupling limit). Dann macht es in der Tat wenig Unterschied, ob man die gesamte kinetische Energie oder nur deren intrinsischen Anteil in H_{intr} benutzt. Die Güte dieser Annahme hängt bei bekannten quantenmechanischen Vielteilchensystemen wie Atomen, Molekülen oder Atomkernen von der Teilchenzahl einerseits und der Deformation andererseits ab, d.h. bei großer Teilchenzahl und großer Deformation ist die Adiabasiebedingung beliebig gut erfüllt (siehe I.4).

Man macht eine weitere vereinfachende Annahme über die potentielle Energie

$$\sum_{i<k} V(\vec{r}_i - \vec{r}_k) = \sum_i V_S(\vec{r}_i, \vec{p}_i) + V_{rest} \tag{7}$$

V_S = Schalenmodellpotential

Der translations- und rotationsinvariante potentielle Anteil des Hamiltonoperators wird in zwei Anteile aufgespalten, die für sich alleine nicht mehr invariant sind. Die Erfolge und die Einfachheit von V_S rechtfertigen diesen Ansatz. Im folgenden soll speziell der Schalenmodellhamiltonoperator

$H_{intr} \approx H_S = T + V_S$ untersucht werden. (8)

H_S unterscheidet sich von H_{intr} insbesondere dadurch, daß es Funktion aller 3A Teilchenkoordinaten ist, während H_{intr} nur Funktion von (3A - Zahl der Kollektivvariablen) Koordinaten ist. In den Vielteilchenwellenfunktionen von H_S wird eine überzählige (spuriose) Bewegung stecken, die von den zu vielen Freiheitsgraden von H_S herrührt. Andererseits kann man sagen, daß bei Kenntnis dieser spuriosen Bewegung H_S dann gute Aussagen über H_{intr} liefert, wenn V_{rest} eine kleine Korrektur ist. Aus dieser Überlegung heraus ergibt sich das Projektionsverfahren spurioser Zustände.

Wir definieren 3 Koordinatensysteme:

1. Das Lab-System in dem H aufgeschrieben ist.
2. Das Hilfssystem in dem H_S definiert ist, ebenfalls ein Laborsystem in dem alle 3A Teilchenkoordinaten unabhängig sind, nur ist dieses System gegenüber dem ersten translatiert und gedreht.
3. Das intrinsische (körperfeste) System, in dem es nur (3A - K) unabhängige Koordinaten gibt.

Die spuriose Bewegung äußert sich darin, daß das Hilfssystem kleine Wackelbewegungen bezüglich intrinsischem Systems ausführt. Wie im folgenden gezeigt wird, gelingt es, die Größen, die diese spuriosen Oszillationen bestimmen, auf Teilchenkoordinaten zurückzuübersetzen, da es sich in allen betrachteten Fällen um kleine Schwingungsamplituden handelt. In den weiteren Kapiteln wird auf die Lösung des gesamten physikalischen Problems, die Berechnung von H, nicht mehr eingegangen. Alle weiteren Überlegungen beziehen sich ausschließlich auf Hilfssystem und intrinsisches System. Wenn also insbesondere vom Gesamtdrehimpuls J die Rede ist, so bezieht sich dieser ausschließlich auf die Vielteilchenwellenfunktionen von H_S und hat nichts mit dem oben definierten I zu tun. J beschreibt den Gesamtdrehimpuls von innerer und spurioser Bewegung und hat nichts mit dem die kollektiven physikalischen Rotationen beschreibenden I gemein. Auf diesen wichtigen Unterschied sei eigens hingewiesen, da es sonst leicht zu Verständnisschwierigkeiten kommt. Die Bedeutung von J' bleibt die alte.

I.2 Der einfache Fall der Schwerpunktszustände

Das Vorgehen, durch eine Koordinatentransformation H_{intr} aus H_S zu erhalten, werde am besonders einfachen Beispiel des Schwerpunkts erläutert. Die Transformation lautet

$$x'_{i\kappa} = \bar{x}_{i\kappa} - \bar{X}_\kappa \qquad \bar{X}_\kappa = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A} \bar{x}_{i\kappa} \qquad P_\kappa = \sum_{i=1}^{A} \bar{p}_{i\kappa} \tag{9}$$

$$p'_{i\kappa} = \bar{p}_{i\kappa} - \frac{1}{A} P_\kappa \qquad \kappa = x, y, z$$

wobei $x'_{ik} = x'_{ik}(\xi_\nu)$ die Teilchenkoordinaten im inneren System bezeichnen, ausschließlich Funktionen der (3A - 3) intrinsischen Koordinaten. $\bar{x}_{ik}$ sind die 3A linear unabhängigen Teilchenkoordinaten im Hilfssystem.

$$H_S = \sum_i \frac{\bar{\vec{p}}_i^{\,2}}{2m} + \sum_i V(\bar{\underset{\sim}{x}}_i, \bar{p}_i) = \sum_i T_i + \sum_i V(\underset{\sim}{x}'_i + \underset{\sim}{\bar{X}}, \underset{\sim}{p}'_i + \frac{1}{A}\underset{\sim}{P}) \tag{10}$$

Durch eine Taylorentwicklung von V nach der kleinen Größe $\bar{X}$ erhält man

$$H_S = \frac{1}{A}\sum_{i<j} \frac{(\bar{\underset{\sim}{p}}_i - \bar{\underset{\sim}{p}}_j)^2}{2m} + \sum_i V(\underset{\sim}{x}'_i, \underset{\sim}{p}'_i) + \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2mA} + \sum_i (\underset{\sim}{\bar{X}} \nabla_i) V_0(x'_i) + \frac{1}{2}(\bar{\underset{\sim}{X}} \nabla_i)^2 V_0(x'_i) \tag{11}$$

+ höhere auch impulsabhängige Glieder

$$= H_{intr} + H_{CM} + H_{Koppel}.$$

mit

$$H_{intr} = \frac{1}{A}\sum_{i<j} \frac{(\bar{p}_i - \bar{p}_j)^2}{2m} + \sum_i V(\underset{\sim}{x}'_i, p'_i)$$

$$H_{CM} = \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2mA} + W(\bar{\underset{\sim}{X}}^2)$$

Man wird $W(\bar{\underset{\sim}{X}}^2)$ so wählen, daß es die aus der Taylorentwicklung stammenden Glieder optimal approximiert. In V_0 sind die impulsabhängigen Terme aus V vernachlässigt, da diese wegen ihrer Kleinheit

wiederum eine Korrektur zu den angegebenen Gliedern darstellen und zu den höheren Korrekturtermen zu zählen sind.

$$H_{intr} = H_S - H_{CM} - H_{koppl} \tag{12}$$

Dieses allgemeine Konzept vereinfacht sich wesentlich, wenn man für V ein Oszillator- oder oszillatorähnliches Potential wie das Nilssonpotential wählt. Dann erübrigt sich die Taylorentwicklung, da sich die Transformation exakt ausführen läßt bis auf impulsabhängige Korrekturterme, die wir wieder vernachlässigen wollen.

$$\begin{aligned} V_N &= \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{A} \left\{ \omega_x^2 (\bar{x}_i^2 + \bar{y}_i^2) + \omega_z^2 \bar{z}_i^2 + C \vec{l}_i \vec{s}_i + D \vec{l}_i^{\,2} \right\} \\ &= \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{A} \left\{ \omega_x^2 (x_i'^2 + y_i'^2) + \omega_z^2 z_i'^2 + C \vec{l}_i' \vec{s}_i' + D \vec{l}_i'^{\,2} \right\} + \\ &\quad + \frac{mA}{2} \left[\omega_x^2 (\bar{X}_x^2 + \bar{X}_y^2) + \omega_z^2 \bar{X}_z^2 \right] + \cdots \end{aligned} \tag{13}$$

Da wir im folgenden stets oszillatorähnliche Potentiale behandeln wollen, werden wir dieses vereinfachte Konzept auch bei den Rotationsoszillationen anwenden, wobei H_{intr} stets durch das Schema entsteht

$$H_{intr} = H_S - H_{CM} - H_{rot} - H_{koppl}, \tag{14}$$

denn, wie wir sehen werden, gelingt es in guter Näherung, die rechten Terme im Hilfssystem zu berechnen, womit wir auch H_{intr} im Hilfssystem erhalten. Der Grund dafür, daß wir unsere Rechnungen im Hilfssystem durchführen wollen, ist einfach der, daß wir dort mit 3A-unabhängigen Teilchenkoordinaten rechnen können, insbesondere also die Aufstellung der Wellenfunktionen und die Wirkung von Differentialoperatoren in einfacher Weise angebar ist, während dies im intrinsischen System wegen der linearen Abhängigkeit der $\underset{\sim}{x}_i'$ nicht so einfach geht (II.1). Die Transformation ins intrinsische

System erübrigt sich, da die so erhaltene Wellenfunktion faktorisieren muß.

$$\Psi_{n\alpha}(\underset{\sim}{\bar{x}_i}) = \phi_{n\alpha}(\underset{\sim}{\bar{X}}) \cdot \chi_n(x_i'(\xi_\nu)) \tag{15}$$

Dabei ist $\phi_{n\alpha}(\underset{\sim}{\bar{X}})$ eine beliebige normierte Fkt der Schwerpunktsvariablen $\underset{\sim}{\bar{X}}$, auf die H_{intr} nicht wirkt, die somit auch die Energieeigenwerte von H_{intr} nicht verändert.

$$H_{intr}\,\Psi_{n\alpha} = \varepsilon_n \Psi_{n\alpha} \tag{16}$$

Will man jedoch Übergangswahrscheinlichkeiten anderer intrinsischer Operatoren berechnen, die in den $\chi_n(\xi_\nu)$ nicht diagonal sind, ist eine weitere Kenntnis auch von $\phi_{n\alpha}(\underset{\sim}{\bar{X}})$ nötig, da diese wohl normiert, aber nicht orthogonal zu sein brauchen und es auch tatsächlich nicht sind, so daß die Überlappintegrale $\langle \phi_{n\alpha} | \phi_{n'\alpha'} \rangle$ auftreten. Hier bieten sich zwei Möglichkeiten an

1. Man entwickle $\phi_{n\alpha}(\underset{\sim}{\bar{X}})$ nach den Eigenfunktionen von H_{CM}, was bei oszillatorähnlichen Potentialen besonders einfach erscheint, da H_{CM} dann selbst ein harmonischer Oszillator in der Schwerpunktsvariablen $\underset{\sim}{\bar{X}}$ ist. (Ausführlich siehe III.2).

2. Man diagonalisiere H_{CM} in den $\Psi_{\alpha j}$ und erhält damit neue Funktionen $\varphi_{nK} = \sum_\alpha b_{K\alpha} \Psi_{n\alpha}$ derart, daß

$$\varphi_{nK} = \tilde{\phi}_{nK}(\underset{\sim}{\bar{X}}) \cdot \chi_n(\xi_\nu) \qquad K = 0, 1, 2, \ldots \tag{17}$$

ist, wobei $\tilde{\phi}_{nK}(\underset{\sim}{\bar{X}})$ jetzt Eigenzustände von H_{CM} sind. Die $\chi_n(\xi_\nu)$ sind unverändert unter den $\chi_n(x_i'(\xi_\nu))$ zu finden, da H_{CM} nicht mehr auf die intrinsischen Anteile wirkte. Deshalb zerfällt durch diese Diagonalisierung die ursprüngliche Funktionenklasse $\Psi_{n\alpha}$ nunmehr in Funktionenklassen φ_{nK} $(K = 0, 1, 2, \ldots)$, die nach der Schwerpunktsanregung klassifiziert sind. Für jedes K enthält eine solche Funktionenklasse φ_{nK} das <u>gesamte intrinsische</u> Spektrum $\chi_n(\xi_\nu)$ und man wird sich zweckmäßigerweise

die Funktionsklasse heraussuchen, die die Schwerpunktsbewegung im Grundzustand erhält.

So schön dieses zweite Verfahren ist, führt es doch zu erheblichen numerischen Schwierigkeiten, da H_{CM} nur dann von Null verschiedene Nichtdiagonalelemente hat, wenn $\psi_{n\alpha}$, $\psi_{n'\alpha'}$ denselben intrinsischen Zustand enthalten, die beiden Wellenfunktionen also zueinander spurios sind. Um eine solche Funktionenklasse zu erhalten, wendet man den Trick an, daß man sich mit

$$a^{+}\psi_{n\alpha} \sim \phi_{n\alpha+1}\,\chi_{n}(\xi_{\nu}) \quad \text{und}$$
$$a\,\psi_{n\alpha} \sim \phi_{n\alpha-1}\,\chi_{n}(\xi_{\nu}) \tag{18}$$

spuriose Zustände erzeugt, wobei diese Phononenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren freilich auf Teilchenkoordinaten zu übersetzen sind, so daß ihre Anwendung möglich ist. Man muß dabei nur aufpassen, daß man nicht Zustände erzeugt, die zufällig bereits unter den $\psi_{n\alpha}$ zu finden sind, da sonst Entartung auftritt, was das Eigenwert-problem unnötig kompliziert. Die praktische Durchführbarkeit des zweiten Verfahrens hängt also wesentlich von einem geeigneten Funktionensatz ab. Da dieser aber durch das Vielteilchenanregungsspektrum des Schalenmodellhamiltonoperators bis auf die Ergänzungen (18) festgelegt ist, hat man es hier mit der praktischen Schwierigkeit zu tun, sehr große Matrizen verwenden zu müssen.

Die erste Methode (17) hat den Vorteil, einen Überblick darüber zu geben, wie stark höhere Schwerpunktsanregungen insbesondere die Einphononen- und Zweiphononenanregungen in einer Wellenfunktion $\psi_{n\alpha}$ vertreten sind. Sie wird in (III.2) genauer diskutiert. Der Nachteil ist, daß man auf eine rasche Konvergenz der Entwicklung von $\phi_{n\alpha}(\bar{\underset{\sim}{X}})$ angewiesen ist, was jedoch bei den meisten Zuständen der Fall ist. Der zur Zeit beste Weg ist folgendes Vorgehen: Man sortiere mit dem Verfahren 2 von (17) die ziemlich reinen spuriosen Zustände (darunter wollen wir im weiteren die Zustände verstehen, die die kollektive Anregung im wesentlichen in Ein- oder Mehrphononenzuständen hat) heraus und wende auf die verbliebenen Zustände

Ψ_n das erste Verfahren an.+) Dann erhält man mit guter Genauigkeit Wellenfunktionen

$$\Psi_n = \sum_{K=0,1,\ldots} a_K^n |K\rangle \chi_n(\xi_\nu) = \phi_n(\underset{\sim}{\bar{X}}) \chi_n(\xi_\nu) \tag{19}$$

Die Koeffizienten a_K^n sind nunmehr bis zu einem gewissen K bekannt, so daß die Wellenfunktionen Ψ_n einen vollen Ersatz für die unbekannten $\chi_n(\xi_\nu)$ darstellen, da die Überlappintegrale

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \sum_K a_K^n a_K^{n'}$$

nunmehr bekannt sind.

+) Die Klassifizierung der Spuriosität eines Zustandes geschieht ganz analog (III.2) durch

$$E_{CM} = \langle \varphi_{nK} | H_{CM} | \varphi_{nK} \rangle \quad , \quad \Delta E_{CM} = \langle \varphi_{nK} | T_{CM} - W(\underset{\sim}{\bar{X}}^2) | \varphi_{n,K} \rangle$$

und die Normierung.

I.3 Das analoge Vorgehen bei den Rotationsoszillationen

Ganz analog wie bei der Schwerpunktsbewegung gehen wir bei den Rotationsoszillationen vor. Die Koordinatentransformation lautet (Anhang A1)

$$\begin{aligned} x'_{iB} &= \sum_{\alpha=1,2,3} R_{\alpha B}(\vartheta_j)\,(\bar{x}_{i\alpha}-\bar{X}_\alpha) \\ p'_{iB} &= \sum_{\alpha=1,2,3} R_{B\alpha}(\vartheta_j)\Big[\Big(p_{i\alpha}-\frac{1}{A}P_\alpha\Big) - \sum_C M_{i\alpha,C}\,(L_C-L'_C)\Big] \end{aligned} \tag{20}$$

Griechische Indices bedeuten die drei Raumkoordinaten im Hilfssystem, die Großbuchstaben beziehen sich auf das intrinsische System. Das intrinsische Koordinatensystem werde in das Hauptachsensystem des Vielteilchensystems gelegt, was die Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^{A} x'_{iB} = 0 \quad (B=1,2,3) \qquad I_{AB} = \sum_{i=1} x'_{iB}\,x'_{iC} = 0 \quad (B,C) \text{ zyklisch} \tag{21}$$

beinhaltet. Da wir uns im Folgenden auf den Spezialfall axialsymmetrisch deformierter Systeme (der wohl häufigste Fall in der Kernphysik) beschränken wollen, fällt eine der drei Nebenbedingungen für die Deviationsmomente weg. Es sei im folgenden $I_{x'y'} \neq 0$ angenommen. Die ersten drei Nebenbedingungen aus (21) legen den Schwerpunkt $\underset{\sim}{X}$ fest, das Verschwinden zweier Deviationsmomente bestimmt zwei Eulerwinkel. Dies bedeutet

$$\bar{x}_{i\alpha} \longrightarrow x'_{iB}(\xi_\nu),\ \underset{\sim}{X},\ \vartheta_x, \vartheta_y$$

mit 3A - 5 unabhängigen Koordinaten ξ_ν. Der Schalenmodellhamiltonoperator H_S (10) nimmt somit die Gestalt an

$$\begin{aligned} H_S &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V_i(\underset{\sim}{\bar{x}}_i, \underset{\sim}{p}_i) \\ &= \sum_i T_i + V\Big(\sum_\alpha\Big(\bar{X}_\alpha+\sum_B R_{B\alpha}(\vartheta_j)\,x'_{iB}\Big), \sum_\alpha\Big(\frac{1}{A}P_\alpha+\sum_B R_{\alpha B}(\vartheta_j)\,p'_{iB}+\sum_C M_{i\alpha,C}(L_C-L'_C)\Big)\Big) \end{aligned} \tag{22}$$

Nun könnte man wie in (11) eine Taylorentwicklung machen, wobei $R_{B\alpha}(\vartheta_j)$ die Drehmatrixelemente wegen der Kleinheit von ϑ_j nach Potenzen von ϑ_j zu entwickeln wären. Da wir uns jedoch auf oszillatorähnliche Potentiale beschränken wollten, werden wir auch hier

die Transformation direkt ausführen, wobei wie im Falle des Schwerpunkts impulsabhängige Korrekturterme aus denselben Gründen vernachlässigt werden. Für H_S setzen wir die Aufspaltung an

$$H_S = T_{intr} + \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2mA} + \sum_B \frac{(\mathcal{J}_B - \mathcal{J}_B')^2}{2\Theta_B} + V_{intr} + W(\underset{\sim}{\bar{X}}^2) + V_{rot}(\vartheta_j) + V'_{Koppel} \qquad (23)$$

woraus folgt

$$H_{intr} = \sum_i T_i - \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2mA} - \sum_B \frac{(\mathcal{J}_B - \mathcal{J}_B')^2}{2\Theta_B} + \sum_i V(\underset{\sim}{\bar{x}}_i) -$$

$$- W(\underset{\sim}{\bar{X}}^2) - V_{rot}(\vartheta_j) - V'_{Koppel}(\underset{\sim}{\bar{x}}, \vartheta_j, \underset{\sim}{\bar{X}})$$

$$= H_S - H_{CM} - H_{rot} - H_{Koppel}$$

mit

$$H_{CM} = \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2mA} + W(\underset{\sim}{\bar{X}}^2)$$

$$H_{rot} = \frac{\lambda}{2} \bar{\mathcal{J}}^2 + V_{rot}(\vartheta_j)$$

$$H_{Koppel} = \sum_B \frac{(\mathcal{J}_B - \mathcal{J}_B')^2}{2\Theta_B} - \frac{\lambda}{2} \bar{\mathcal{J}}^2 + V'_{Koppel}$$

Dabei ist λ ein freier Parameter, der geeignet zu wählen ist (s.u.) und $\bar{\mathcal{J}}$ ist der auf das Hilfssystem bezogene Gesamtdrehimpuls $\mathcal{J}$. Diese Aufspaltung ist natürlich in gewisser Weise willkürlich, aber wie sich zeigte wegen der Kleinheit des Kopplungstermes bei geeignetem λ sehr zweckmäßig. Sie wurde vorgenommen, um die Operatoren

H_{CM}, H_{rot} zu definieren. Die praktischen Rechnungen verwenden für H_{intr} den folgenden Ausdruck

$$H_{intr} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{P^2}{2mA} - \sum_B \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B} + \sum_i V(x_i', p_i') \, , \qquad (24)$$

wobei analog (11) $\sum_i V(x_i', p_i')$ als erstes Glied der Taylorentwicklung bzw. als das Glied anzusehen ist, das die Eulerwinkel in 0.ter Näherung enthält, also rein intrinsisch ist. Für die Rechnungen des Kapitels III wo $H_S = H_{Nilsson}$ gesetzt wird, wird (24) die definierende Gleichung für H_{intr} sein, wobei $V(x_i', p_i') = V_{Nils}(x_i', p_i')$, das Nilssonpotential als Funktion der intrinsischen Koordinaten angesetzt wird.

Die Berechnung von H_{intr} erfolgt wieder im Hilfssystem, wobei insbesondere der Rotationsterm vom intrinsischen System ins Hilfssystem zu transformieren ist (Kapitel II). Für die Wellenfunktionen folgt die Faktorisierung

$$\psi_{n\alpha}(\bar{x}_i) = \Lambda_m(\bar{X}) \cdot \phi_{n\alpha}(\vartheta_j) \cdot \chi_n(x_i'(\xi_\nu)) \; . \qquad (25)$$

Bei mittelschweren Kernen erweist sich $\Lambda_n(\bar{X})$ bei Anregungsenergien unter $\hbar\omega_0$ in guter Näherung als Grundzustandsfunktion des Schwerpunktshamiltonoperators, womit sich das vereinfachte Problem ergibt

$$\psi_{n\alpha}(\bar{x}_i) = \Lambda_0(\bar{X}) \cdot \phi_{n\alpha}(\vartheta_j) \cdot \chi_n(x_i'(\xi_\nu)) \; , \qquad (26)$$

das genau der Zerlegung (15) entspricht, so daß die Behandlung genauso erfolgt, nur tritt an die Stelle von H_{CM} jetzt H_{rot}, der Schwerpunktsanregung entspricht die Rotationsanregung.
Zwei wesentliche Unterschiede treten jedoch auf:

1. Der kinetische Anteil von H_{rot} ist nicht, wie man analog zum Schwerpunkt vermutet hätte, $T_{rot} = \sum_B \frac{J_B^2}{2\Theta_B}$ sondern

$T_{rot} = \frac{\lambda}{2} \bar{J}^2$, wobei man über λ zweckmäßig so verfügt, daß der Kopplungsterm möglichst klein wird. Es hat sich gezeigt, daß die Erwartungswerte

$$\left\langle \sum_B \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B} \right\rangle \approx \langle V_{rot}(\vartheta_j) \rangle$$

sind, so daß λ so gewählt wurde, daß

$$\frac{\lambda}{2} \langle 0 | \bar{J}^2 | 0 \rangle = \langle 0 | V_{rot}(\vartheta_j) | 0 \rangle$$

ist. Es stellt damit keinen neuen Parameter in dieser Theorie dar.

2. Im Falle von nur zwei Eulerwinkeln sind $\bar{J}$ und ϑ_j keine kanonisch konjugierten Variablen mehr. Es gilt nur noch in guter Näherung bei kleinen Winkeln (Anhang A1.16).

$$\bar{J}_x \approx \frac{\partial}{\partial \vartheta_x} \quad , \quad \bar{J}_y \approx \frac{\partial}{\partial \vartheta_y}$$

I. 4 Die asymptotischen Fälle sehr grosser und verschwindender Deformation.

A. Der Fall verschwindender Deformation

Im Falle eines nichtdeformierten Vielteilchensystems ist die Einführung von Eulerwinkeln zur Festlegung des intrinsischen Systems sinnlos, solange man nur rotationssymmetrische Zustände betrachtet. In diesem Falle wird nur die Schwerpunktsbewegung abgespalten; es gibt (3A-3) intrinsische Koordinaten. Jedoch schon bei kleiner Deformation kann man das kollektive Phänomen der Rotationen auch kollektiv durch Eulerwinkel beschreiben und nicht mehr mikroskopisch. Behandelt man also deformierte Systeme und versucht Rechnungen, bei denen die Deformation allmählich abgeschaltet wird, so behält man in den Vielteilchenfunktionen (3A-3-K) intrinsische Koordinaten (K=Zahl der eingeführten Eulerwinkel). Die Deformation Null stellt somit einen sigulären Punkt dar. Die Berücksichtigung einer Restwechselwirkung sorgt bei verschwindender Deformation dafür, dass der Schalenmodellgrundzustand ein Zustand zu gutem Drehimpuls J wird. Bei aufgefüllten Schalen ist J = 0, bei unaufgefüllten Schalen ist auch $J \neq 0$ zulässig, da dann die Deformation Null nicht die Grundzustandsdeformation ist. Das reine Schalenmodell liefert demgegenüber mit der Vorschrift, bei fester Teilchenzahl stets die untersten Niveaus aufzufüllen, keinen Zustand mit J= const sondern einen deformierten Zustand mit nichtverschwindendem Quadrupolmoment und J-Mischung. Dennoch ist die in dieser Arbeit benutzte reine Schalenmodellbeschreibung ohne Restwechselwirkung auch bei kleinen Deformationen brauchbar, da sie als mittleres $\bar{J}$ etwa das J= const liefert, das eine Restwechselwirkungsrechnung ergeben würde. Allerdings führt die Aufrauhung der Fermikante durch eine Restwechselwirkung zu einer anderen Grundzustandskonfiguration. Es lassen sich deshalb sinnvoll im Schalenmodell ohne Restwechselwirkung nur solche Grössen bei kleinen Deformationen verfolgen, die genügend konstant verlaufen, d.i. nach den obigen Überlegungen der kinetische Term $\sum_{B} \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B}$ (s. auch Kapitel IV.1). Für den weniger konstanten potentiellen Term kann man zu einer Abschätzung des Verhaltens für $\delta \rightarrow 0$ kommen, wenn man die Bedingung mit einbaut, dass für

kleine δ der Grundzustand nur in der Grössenordnung $\delta, \delta^2 \cdots$ Glieder mit $J \neq$ const enthalten darf. Die so erhaltenen Grundzustandsenergien werden bei einer Deformation, bei der die Rechnung mit Eulerwinkeln bereits gut ist ($\langle \vartheta^2 \rangle \lesssim (15^0)^2$) einander angepasst. Damit ist ein geeigneter Grenzübergang zu verschwindender Deformation aufgezeigt, wobei die Anpassungsvorschrift lautet $\langle 0 | H_{int} | 0 \rangle = E_\delta$

$$E_\delta = E_0 + \delta \langle \psi_{00}^{n_r} | H_\delta' | \psi_{00}^{n_r} \rangle + \delta^2 \sum_{n \neq 0} \frac{|(H_\delta')_{n,0}|^2}{E_0 - E_n^{(0)}} + \cdots$$

$$H_\delta' = \text{Störhamiltonoperator} = \frac{1}{\delta} H_\delta$$

Rechnet man mit einem über alle Zustände unterhalb der Fermikante gemittelten n_r (n_r = radiale Quantenzahl), so kommt man im Falle eines Oszillatorpotentials mit $H_\delta = -\delta \cdot 4/3 \sqrt{\frac{\pi}{5}}\, r^2 Y_{20}$ zu folgender Abschätzung

$$J = 0 \quad : \qquad E_\delta = E_0 - \delta^2 \frac{4}{45} \cdot \frac{\bar{N}(\bar{N}+3)}{|\Delta E|} \tag{27}$$

$$J \neq 0 \quad : \qquad E_\delta = E_0 + \frac{\delta}{6\sqrt{5}} \sqrt{\bar{N}(\bar{N}+3)} - \delta^2 \cdot \frac{1}{45} \frac{\bar{N}(\bar{N}+3)}{|\Delta E|}$$

$\bar{N}$ = gemittelte Hauptquantenzahl

Die Korrekturen in den Figuren 1 und 2 wurden mit diesen Näherungsausdrücken berechnet, wobei es sich natürlich nur um eine grobe Abschätzung handeln kann. Da aber der Interpolationsbereich klein bleibt, wird die Korrektur doch auf o.o5 $\hbar\omega_0$ richtig. Will man sich mit der Abschätzung nicht begnügen, muss man E_δ mittels Teilchen-Lochwellenfunktionen genauer berechnen.

B. Der asymptotische Fall sehr grosser Deformation.

Wir zeigen zunächst, dass in diesem Fall $J' \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{}$ const . Dazu genügt es zu zeigen, dass $L' \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{} 0$ geht, womit $J' = L' + S'$ einen endlichen (s. Anhang A 1.16) Wert behält. Da $J_B, \Theta_B \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{} \infty$ gehen, heisst dies,

dass

$$\sum_B \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B} \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{} \sum_B \frac{J_B^2}{2\Theta_B} \quad \text{geht.}$$

(28)

Dann nimmt die kinetische Energie die einfache Form an

$$\sum_i \frac{p_i^2}{2m} = T_{int} + \sum_B \frac{J_B^2}{2\Theta_B}$$

Da gleichzeitig die Eulerwinkel $\vartheta_j \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{} 0$ gehen, spaltet auch das Oszillator- oder oszillatorähnliche Schalenmodellpotential

$$\sum_i V(\tilde{\underset{\sim}{x}}_i, p_i) = \sum_i V(\underset{\sim}{x}_i', \bar{\underset{\sim}{X}}, \vartheta_j, p_i')$$

auf in (29)

$$\sum_i V(\bar{\underset{\sim}{x}}_i, \underset{\sim}{p}_i) = \sum_i \hat{V}(\underset{\sim}{x}_i', \bar{\underset{\sim}{X}}, p_i') + \sum_j \frac{\lambda}{2} \Omega_j^2 \vartheta_j^2$$

wobei $\frac{\lambda}{2} \Omega_j^2$ eine Konstante ist. Dass es zu der Aufspaltung (29) kommt, ist unmittelbar einzusehen, da für $\vartheta_j \longrightarrow 0$ die Drehmatrizen (2o)

$$R_{A\alpha}(\vartheta_j) \xrightarrow[\delta \to \delta_\infty]{} 1 \pm \vartheta_j + O(\vartheta_j^2) \qquad (30)$$

übergehen. Die Taylorentwicklung des Potentials nach den kleinen Grössen ϑ_j liefert ganz analog (11) zunächst Terme in $\vartheta_j, \vartheta_j^2, \ldots$,wobei die Glieder

$$\sum_{i,j} (\vartheta_j \nabla_i) V_0(\underset{\sim}{x}_i') + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\vartheta_j \nabla_i)^2 V_0(\underset{\sim}{x}_i') \qquad (31)$$

über die Nebenbedingungen (21) in $\sum_j c_j \vartheta_j^2$ übergehen.

Diese Aussagen gelten streng nur für Oszillator- und oszillatorähnliche Potentiale, da sich nur dann (31) zusammenfassen lässt. Für andere Potentiale bleibt auch für $\vartheta_j \to 0$ ein Kopplungsterm

$$V_{Koppl}(\underset{\sim}{x}_i', \bar{\underset{\sim}{X}}, \vartheta_j)$$

bestehen, während die kinetische Energie stets für $\vartheta_j \to 0$ in (28) übergeht.

Das Oszillatorpotential nimmt also sowohl im Falle der Schwerpunktsoszillationen wie bei den Rotationsoszillationen eine Sonderstellung unter allen möglichen Schalenmodellpotentialen ein: der Schwerpunktsanteil lässt sich exakt abspalten für alle Deformationen δ , der Rotationsanteil separiert noch für die asymptotische Deformation δ_{∞} exakt ab.

II. Die Anwendung auf axialsymmetrische Potentiale

Waren die Aussagen des Kapitels I noch auf die Beschreibung beliebig deformierter Vielteilchensysteme anwendbar, so wollen wir uns im folgenden nur mehr axialsymmetrischen Gestalten zuwenden, insbesondere der Beschreibung durch axialsymmetrische Potentiale.

II.1 Der intrinsische Hamiltonoperator

Zur Herleitung der kinetischen Energie T_{intr} verweise ich auf Villars[4)], speziell bei Verwendung von nur zwei Eulerwinkeln ϑ_x, ϑ_y auf B.Fink[4)] und beschränke mich hier darauf, T_{intr} so zu transformieren, dass es der praktischen Berechnung zugänglich wird.

$$\begin{aligned} T_{in} &= T - T_{CM} - T_{rot} \\ &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{P^2}{2Am} + \frac{\hbar}{i} \operatorname{tg} \vartheta_y \frac{G^{-1}}{2m} \left\{ I_{12} N_1 - (I_3 - I_1) N_2 \right\} - \\ &\quad - \frac{1}{2m} G_0^{-1} G \left\{ (I_1 + I_3) N_1^2 + (I_2 + I_3) N_2^2 - I_{12} (N_1 N_2 + N_2 N_1) \right\} \end{aligned} \qquad (32)$$

mit

$$(G_0^{-1} G)^{-1} = (I_1 + I_3)(I_2 + I_3) - I_{12}^2$$

$$G = I_{12}^2 - (I_1 - I_3)(I_2 - I_3)$$

Die Transformation dieses im inrinsischen System gegebenen Ausdrucks erfolgt nach der Beziehung $N_C = N_{AB} = \sum_{\alpha,\beta} R_{A\alpha} R_{B\beta} N_{\alpha\beta}$

Nach Anhang (A 1.18) ergibt sich schliesslich

$$\begin{aligned} T_{in} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{P^2}{2Am} - & \qquad (33) \\ - \frac{1}{2m} \Big\{ G_0^{-1} G \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \Big[(I_1+I_3) R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} + (I_2+I_3) R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{1\gamma} R_{3\delta} - 2 I_{12} R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} \Big] N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} + \\ + \frac{\hbar}{i} G^{-1} \sum_{\alpha,\beta} \Big[(I_2 - I_3)(R_{1\alpha} R_{1\beta} - R_{3\alpha} R_{3\beta}) + (I_1 - I_3)(R_{2\alpha} R_{2\beta} - R_{3\alpha} R_{3\beta}) - 2 I_{12} R_{2\alpha} R_{1\beta} \Big] N_{\alpha\beta} \Big\} \end{aligned}$$

Diese Form eignet sich nun zur Berechnung, da nur noch die Trägheits- und Deviationsmomente ins Hilfssystem zu übersetzen sind durch die Vorschrift

$$I_c = \sum_i x_{ic}'^2 = \sum_{i,\alpha,\beta} R_{c\alpha} R_{c\beta} \bar{x}_{i\alpha} \bar{x}_{i\beta} = \sum_{\alpha,\beta} R_{c\alpha} R_{c\beta} I_{\alpha\beta} \tag{34}$$

$$I_{12} = \sum_i x_{i1}' x_{i2}' = \sum_{i,\alpha,\beta} R_{1\alpha} R_{2\beta} \bar{x}_{i\alpha} \bar{x}_{i\beta} = \sum_{\alpha,\beta} R_{1\alpha} R_{2\beta} I_{\alpha\beta}$$

mit $$I_{\alpha\beta} = \sum_i \bar{x}_{i\alpha} \bar{x}_{i\beta}$$

Für (33) lässt sich noch ein Näherungsausdruck angeben, da in praktischen Fällen stets $I_{12} \approx 0$ ist

$$\begin{aligned} T_{in} = & \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{\underset{\sim}{P}^2}{2Am} \\ & - \frac{1}{2m} \Big\{ \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \Big[\frac{1}{I_2 + I_3} R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} + \frac{1}{I_1 + I_3} R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{1\gamma} R_{3\delta} \Big] N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} - \\ & - \frac{\hbar}{i} \sum_{\alpha,\beta} \Big[\frac{1}{I_3 - I_1} \left(R_{3\alpha} R_{3\beta} - R_{1\alpha} R_{1\beta} \right) + \frac{1}{I_3 - I_2} \left(R_{3\alpha} R_{3\beta} - R_{2\alpha} R_{2\beta} \right) \Big] N_{\alpha\beta} \Big\} \end{aligned} \tag{35}$$

Interessiert man sich für die erste Näherung im Winkel $R(\vartheta_j) = 1 \pm \vartheta_i + O(\vartheta^2)$ folgt mit $I_{12} = 0$ und (21)

$$\vartheta_x = \frac{I_{\bar{y}\bar{z}}}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} \qquad \vartheta_y = \frac{I_{\bar{x}\bar{z}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}} \, , \tag{36}$$

was für die Vertauschungsrelation bedeutet (nach A 1.19 berechnet)

$$\left[L_{\bar{x}}, \vartheta_x \right] = \frac{\hbar}{i} \left[1 + 4\vartheta_x^2 + O(\vartheta^3) \right]$$

$$\left[L_{\bar{x}}, \vartheta_y \right] = \frac{\hbar}{i} \left[\frac{I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}} + 2\vartheta_x \vartheta_y + O(\vartheta^3) \right]$$

Dies kann man so interpretieren, dass die konsistente Näherung in den kinetischen Termen dann die Übersetzung $R_{A\alpha}(\vartheta_j) = \delta_{A\alpha}$ ist, womit (35) die schon bei W.Scheid [3] angegebene einfache Form annimmt

$$T_{in} \approx \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{P^2}{2Am} - \frac{1}{2m}\left\{ \frac{N_{\bar{y}\bar{z}}^2}{I_{\bar{y}}+I_{\bar{z}}} + \frac{N_{\bar{x}\bar{z}}^2}{I_{\bar{x}}+I_{\bar{z}}} \right\} \qquad (37)$$

Lediglich der vom 3. Winkel herrührende Term fehlt hier, da ja nur zwei Eulerwinkel eingeführt wurden zur Behandlung eines axialsymmetrischen Problems.

Abschliessend sei eine wichtige Eigenschaft von T_{in} hier ohne Ableitung (s. Fink [4]) angegeben.

$$\left[T_{in} , L_3' \right] = \left[T_{in} , L_3 \right] = 0 \qquad (38)$$

Das heisst, dass die Symmetrieeigenschaften von H_{intr} ausschliesslich durch das Potential gegeben werden. Bei dem axialsymmetrischen Nilsonpotential bedeutet das, dass nicht nur im Hilfssystem $[H_N, L_z] = 0$ mit $L_z \psi_\Omega(\bar{x}_i) = \Omega \psi_\Omega(\bar{x}_i)$ gilt, sondern auch noch

$$[H_{intr}, L_3] = 0 \text{ mit } L_3 \chi_K(\xi_\nu) = K \chi_K(\xi_\nu) \qquad (39)$$

II.2 Die Ausführung der Koordinatentransformation im Falle kleiner Oszillationswinkel.

Nach den Bemerkungen in (36) ist zur Nährung der kinetischen Terme eine Entwicklung der Drehmatrixelemente $R_{A\alpha}(\vartheta_j)$ bis zu linearer Ordnung in ϑ_j nötig, während potentielle Terme, d.h. reine Koordinatenfunktionen bis zu quadratischer Ordnung in ϑ_j zu entwickeln sind. Dies stellt dann eine konsistente Näherung der in (23) auftretenden Terme dar. Die Rechnungen werden stets so ausgeführt, dass erst in den Endausdrücken die Sinus- und Kosinus-funktionen bis zu quadratischen Gliedern entwickelt werden.

Aus (33) wird, termweise aufgeschrieben,

$$G_0^{-1} G (I_1 + I_3) \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} \tag{40}$$

$$\approx \frac{1}{I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}} \left(1 - \vartheta_y^2 \frac{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}}{I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}}\right) \left[(1 - 4\vartheta_x^2) N_{\bar{y}\bar{z}}^2 + 2\vartheta_y N_{\bar{x}\bar{y}} N_{\bar{y}\bar{z}} - 2\vartheta_x N_{\bar{y}\bar{z}} (N_{\bar{y}\bar{y}} - N_{\bar{z}\bar{z}})\right],$$

$$G_0^{-1} G (I_2 + I_3) \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{1\gamma} R_{3\delta} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta}$$

$$\approx \frac{1}{I_{\bar{x}} + I_{\bar{z}}} \left(1 - \vartheta_x^2 \frac{I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}}}{I_{\bar{x}} + I_{\bar{z}}}\right) \left[(1 - 4\vartheta_y^2) N_{\bar{x}\bar{z}}^2 - 2\vartheta_x N_{\bar{x}\bar{y}} N_{\bar{x}\bar{z}} + 2\vartheta_y N_{\bar{x}\bar{z}} (N_{\bar{x}\bar{x}} - N_{\bar{z}\bar{z}})\right],$$

$$- G_0^{-1} G \cdot 2 I_{12} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta}$$

$$\approx - \frac{2 I_{\bar{x}\bar{y}} + 2\vartheta_x \vartheta_y (I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}})}{(I_{\bar{x}} + I_{\bar{z}})(I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}})} \Big[(1 - 4\vartheta_x^2 - 4\vartheta_y^2) N_{\bar{x}\bar{z}} N_{\bar{y}\bar{z}} - \vartheta_x \vartheta_y (N_{\bar{x}\bar{x}} - N_{\bar{z}\bar{z}})(N_{\bar{y}\bar{y}} - N_{\bar{z}\bar{z}}) -$$

$$- \vartheta_x N_{\bar{x}\bar{z}} (N_{\bar{y}\bar{y}} - N_{\bar{z}\bar{z}}) + \vartheta_y N_{\bar{y}\bar{z}} (N_{\bar{x}\bar{x}} - N_{\bar{z}\bar{z}})\Big],$$

während die linear in $N_{\alpha\beta}$ auftretenden Glieder sich wie folgt übersetzen

$$\frac{\hbar}{i} G^{-1}(I_2 - I_3) \sum_{\alpha,\beta} (R_{1\alpha} R_{1\beta} - R_{3\alpha} R_{3\beta}) N_{\alpha\beta} \tag{41}$$

$$\approx \frac{\hbar/i}{I_{\bar z} - I_{\bar x}} (1 - 3\vartheta_y^2) \left[(N_{\bar x\bar x} - N_{\bar z\bar z})(1 - \vartheta_x^2 - \vartheta_y^2) - \vartheta_x^2 (N_{\bar y\bar y} - N_{\bar z\bar z}) - 4\vartheta_y N_{\bar x\bar z} + 2\vartheta_x N_{\bar y\bar z} \right],$$

$$-\frac{\hbar}{i} G^{-1}(I_1 - I_3) \sum_{\alpha,\beta} (R_{3\alpha} R_{3\beta} - R_{2\alpha} R_{2\beta}) N_{\alpha\beta}$$

$$\approx \frac{\hbar/i}{I_{\bar z} - I_{\bar y}} (1 - 3\vartheta_x^2) \left[(N_{\bar y\bar y} - N_{\bar z\bar z})(1 - \vartheta_x^2 - \vartheta_y^2) - \vartheta_y^2 (N_{\bar x\bar x} - N_{\bar z\bar z}) + 4\vartheta_x N_{\bar y\bar z} - 2\vartheta_y N_{\bar x\bar z} \right],$$

$$-\frac{\hbar}{i} G^{-1} 2 I_{12} \sum_{\alpha,\beta} R_{2\alpha} R_{1\beta} N_{\alpha\beta}$$

$$\approx \frac{\hbar}{i} \frac{2\left[I_{\bar x\bar y} + \vartheta_x \vartheta_y (I_{\bar z} - I_{\bar y})\right]\left[1 - 3\vartheta_x^2 - 3\vartheta_y^2 + \vartheta_y^2 \frac{I_{\bar z}}{I_{\bar z} - I_{\bar y}}\right]}{(I_{\bar z} - I_{\bar x})(I_{\bar z} - I_{\bar y})} \times$$

$$\times \left[N_{\bar x\bar y} \left(1 - \frac{\vartheta_x^2}{2} - \frac{\vartheta_y^2}{2}\right) + \vartheta_x N_{\bar x\bar z} - \vartheta_y N_{\bar y\bar z} + \vartheta_x \vartheta_y (N_{\bar y\bar y} - N_{\bar z\bar z}) \right].$$

Man erkennt, wie aufwendig bereits eine weitere Näherung wird, man stellt aber auch fest, dass die noch in (37) in beiden Eulerwinkeln vorhandene Symmetrie nicht mehr gegeben ist, wie man es ja auch aus der Definition von ϑ_x und ϑ_y erwarten muss. Die Näherung (4o, 41) ist deshalb notwendig, um der Tatsache Rechnung zu tragen, dass die Eulerwinkel zwar klein aber immer noch endlich sind und deshalb die beiden Drehungen nicht vertauschbar angenommen werden können. Auf die Interpretation der in (4o) und (41) zusätzlich zu (37) auftretenden Terme wird in II.4 eingegangen.

II.3 Die Übersetzung der Oszillationswinkel auf Teilchenkoordinaten

Die Entwicklung der $R_{A\alpha}(\vartheta_j)$ bis zu linearen Gliedern liefert zusammen mit den Nebenbedingungen (21) die in (36) angegebenen Näherungsausdrücke für ϑ_x, ϑ_y . Sie seien hier noch einmal zum Vergleich aufgeführt

$$\vartheta_x = \frac{I_{\bar{y}\bar{z}}}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} \qquad \vartheta_y = \frac{I_{\bar{x}\bar{z}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}}$$

mit

$$[L_{\bar{x}}, \vartheta_x] = \frac{\hbar}{i}\left\{1 + 4\vartheta_x^2 + O(\vartheta^3)\right\} \tag{42}$$

$$[L_{\bar{x}}, \vartheta_y] = \frac{\hbar}{i}\left\{\frac{I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}} + 2\vartheta_x\vartheta_y + O(\vartheta^3)\right\}$$

Während also die direkte Vertauschungsrelation bereits sehr gut erfüllt ist und erst in quadratischer Ordnung von $\hbar/i$ abweicht, ist die Kreuzrelation nicht Null, sondern weicht schon in erster Ordnung von Null ab. Eine Verbesserung bringt hier die Entwicklung der $R_{A\alpha}(\vartheta_j)$ bis zu quadratischer Ordnung in ϑ_j , womit sich ergibt

$$\vartheta_x = \frac{\left(1 - 2\vartheta_x^2 - \frac{\vartheta_y^2}{2}\right) I_{\bar{y}\bar{z}} + \frac{I_{\bar{x}\bar{z}} I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}}}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} \qquad \vartheta_y = \frac{\left(1 - 2\vartheta_y^2 - \frac{\vartheta_x^2}{2}\right) I_{\bar{x}\bar{z}} + \frac{I_{\bar{y}\bar{z}} I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}} \tag{43}$$

mit

$$[L_{\bar{x}}, \vartheta_x] = \frac{\hbar}{i}\left\{1 - 2\vartheta_x^2 + \frac{\vartheta_y^2}{2} - 2\vartheta_x^2(12\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2) + 7\vartheta_x\vartheta_y \frac{I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} - \frac{I_{\bar{x}\bar{y}}^2}{(I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}})(I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}})}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{1 - 2\vartheta_x^2 + \frac{\vartheta_y^2}{2} + O(\vartheta^3)\right\} \approx \frac{\hbar}{i}\left\{1 - \tfrac{3}{2}\vartheta^2 + O(\vartheta^3)\right\}$$

$$[L_{\bar{x}}, \vartheta_y] = \frac{\hbar}{i}\left\{\left(-6\vartheta_y^2 - \frac{13}{2}\vartheta_x^2\right)\frac{I_{\bar{x}\bar{y}}}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}} + \vartheta_x\vartheta_y\left(2 - 12\vartheta_y^2 - 5\vartheta_x^2\right)\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{2\vartheta_x\vartheta_y + O(\vartheta^3)\right\}$$

Daraus ersieht man, dass sich eine geringfügige Verbesserung der direkten Vertauschungsrelation ergibt, vor allem aber wird der Kreuzterm eine Grössenordnung kleiner.

Es bietet sich noch eine weitere Möglichkeit an, die Winkelnäherung durchzuführen. Man betrachte die aus den Nebenbedingungen (21) entstandenen Gleichungen

$$I_{13} = 0 = \left(\cos^2\vartheta_y - \sin^2\vartheta_y\right)\left(-I_{\bar x\bar y}\sin\vartheta_x + \cos\vartheta_x I_{\bar x\bar z}\right) + $$
$$+ \sin\vartheta_y\cos\vartheta_y\left[2\sin\vartheta_x\cos\vartheta_x I_{\bar y\bar z} + \left(I_{\bar x} - I_{\bar z}\right) + \sin^2\vartheta_x\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)\right] \quad ,$$

(44)

$$I_{23} = 0 = \left(\cos^2\vartheta_x - \sin^2\vartheta_x\right)\cos\vartheta_y I_{\bar y\bar z} + \sin\vartheta_y\left(\cos\vartheta_x I_{\bar x\bar y} + \sin\vartheta_x I_{\bar x\bar z}\right) - \sin\vartheta_x\cos\vartheta_x\cos\vartheta_y\left(I_{\bar y} - I_{\bar z}\right)$$
$$= \sin\vartheta_y\left(I_{\bar x\bar y}\cos\vartheta_x + \sin\vartheta_x I_{\bar x\bar z}\right) + \cos\vartheta_y\left[\left(\cos^2\vartheta_x - \sin^2\vartheta_x\right)I_{\bar y\bar z} + \sin\vartheta_x\cos\vartheta_x\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)\right] .$$

Man erkennt unmittelbar, dass sich aus der 2.Gleichung $\operatorname{tg}\vartheta_y$ ausdrücken lässt als Funktion von ϑ_x .Der erste Ausdruck lässt sich noch auf die Form bringen

$$I_{13} = 0 = \left(\frac{1}{\operatorname{tg}\vartheta_y} - \operatorname{tg}\vartheta_y\right)\left(-I_{\bar x\bar y}\sin\vartheta_x + \cos\vartheta_x I_{\bar x\bar z}\right) + $$
$$+ 2\sin\vartheta_x\cos\vartheta_x I_{\bar y\bar z} + \left(I_{\bar x} - I_{\bar z}\right) + \sin^2\vartheta_x\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)$$

Durch Einsetzen ineinander ergibt sich eine transzendente Gleichung für ϑ_x alleine, die nunmehr schrittweise gelöst werden kann. Da es eine sehr gute Näherung darstellt $\cos\vartheta_x \approx 1 - \frac{\sin^2\vartheta_x}{2}$ zu setzen, erhält man

$$0 = I_{\bar x\bar z}\left(I_{\bar x\bar y}^2 - I_{\bar y\bar z}^2\right) + I_{\bar x\bar y}I_{\bar y\bar z}\left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right) \qquad (45)$$
$$- \sin\vartheta_x\left\{I_{\bar x\bar y}\left[I_{\bar x\bar y}^2 + I_{\bar y\bar z}^2 - 2I_{\bar x\bar z}^2 - \left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)\left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right)\right] + I_{\bar x\bar z}I_{\bar y\bar z}\left[2\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right) - \left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right)\right]\right\} +$$
$$+ \sin^2\vartheta_x\left\{I_{\bar x\bar y}\left[-\tfrac{7}{2}I_{\bar x\bar z}I_{\bar x\bar y} - I_{\bar y\bar z}\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right) - \tfrac{5}{2}I_{\bar y\bar z}\left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right)\right] + I_{\bar x\bar z}\left[I_{\bar x\bar z}^2 + \tfrac{5}{2}I_{\bar y\bar z}^2 + \left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)\left(I_{\bar y} - I_{\bar x}\right)\right]\right\} -$$
$$- \sin^3\vartheta_x\left\{I_{\bar x\bar y}\left[-I_{\bar x\bar y}^2 + 3I_{\bar x\bar z}^2 - 2I_{\bar y\bar z}^2 + \left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right)\left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right)\right] + I_{\bar x\bar z}I_{\bar y\bar z}\left[-3\left(I_{\bar z} - I_{\bar y}\right) + 2\left(I_{\bar z} - I_{\bar x}\right)\right]\right\} +$$
$$+ \; O\left(\sin^4\vartheta_x\right)$$

Diese etwas mühsame Rechnung bietet nun die Möglichkeit, das Konvergenzverhalten direkt zu untersuchen, da kein Einfluss des zweiten Eulerwinkels auf die Näherung mehr besteht.

Bricht man (45) mit erster Ordnung in ϑ_x ab, ergibt sich

$$\left[L_{\bar x}, \vartheta_x \right] = \frac{\hbar}{i} \left[1 + O(\vartheta) \right]$$

$$\left[L_{\bar x}, \vartheta_y \right] = \frac{\hbar}{i} \left[O(\vartheta) \right]$$

Da $\langle I_{\bar z} - I_{\bar x} \rangle = \langle I_{\bar z} - I_{\bar y} \rangle$, $\langle I^2_{\bar x \bar z} \rangle = \langle I^2_{\bar y \bar z} \rangle$, $\langle I_{\bar x} \rangle = \langle I_{\bar y} \rangle$ folgt für (45) näherungsweise

$$\begin{aligned} 0 = {} & I_{\bar x \bar z} \left(I^2_{\bar x \bar y} - I^2_{\bar y \bar z} \right) + I_{\bar x \bar y} I_{\bar y \bar z} \left(I_{\bar z} - I_{\bar x} \right) - \\ & - \sin\vartheta_x \left(1 - \sin^2\vartheta_x \right) \left\{ I_{\bar x \bar y} \left[I^2_{\bar x \bar y} - I^2_{\bar x \bar z} - (I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] + I_{\bar x \bar z} I_{\bar y \bar z} (I_{\bar z} - I_{\bar y}) \right\} + \\ & + \tfrac{7}{2} \sin^2\vartheta_x \left\{ - I_{\bar x \bar y} \left[I_{\bar x \bar z} I_{\bar x \bar y} + I_{\bar y \bar z} (I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] + I_{\bar x \bar z} I^2_{\bar y \bar z} \right\} + O(\sin^4\vartheta_x) , \end{aligned} \tag{46}$$

mit $\sin\vartheta_x \approx \vartheta_x - \frac{\vartheta_x^3}{6}$ schliesslich

$$\begin{aligned} 0 = {} & I_{\bar x \bar z} \left(I^2_{\bar x \bar y} - I^2_{\bar y \bar z} \right) + I_{\bar x \bar y} I_{\bar y \bar z} \left(I_{\bar z} - I_{\bar x} \right) - \\ & - \vartheta_x \left(1 - \tfrac{7}{6} \vartheta_x^2 \right) \left\{ I_{\bar x \bar y} \left[I^2_{\bar x \bar y} - I^2_{\bar x \bar z} - (I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] + I_{\bar x \bar z} I_{\bar y \bar z} (I_{\bar z} - I_{\bar y}) \right\} + \\ & + \tfrac{7}{2} \vartheta_x^2 \left\{ - I_{\bar x \bar y} \left[I_{\bar x \bar z} I_{\bar x \bar y} + I_{\bar y \bar z} (I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] + I_{\bar x \bar z} I^2_{\bar y \bar z} \right\} + O(\vartheta_x^4) \end{aligned}$$

Unter Benutzung von (42) erhält man die Iterationslösung

$$\begin{aligned} 0 = {} & I_{\bar x \bar z} \left(I^2_{\bar y \bar x} - I^2_{\bar y \bar z} \right) + I_{\bar x \bar y} I_{\bar y \bar z} \left(I_{\bar z} - I_{\bar x} \right) - \\ & - \vartheta_x \left(1 - \underline{\tfrac{7}{6} \vartheta_x^2} \right) \left\{ I_{\bar x \bar y} \left[I^2_{\bar x \bar y} - (1 + \vartheta_y^2)(I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] + I_{\bar y \bar z} \vartheta_y (I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right\} + \\ & + \underline{\tfrac{7}{2} \vartheta_x^2} \left\{ I_{\bar x \bar y} \left[- I_{\bar x \bar z} I_{\bar x \bar y} + \vartheta_x (I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right] - I_{\bar y \bar z} \vartheta_x \vartheta_y (I_{\bar z} - I_{\bar y})(I_{\bar z} - I_{\bar x}) \right\} + O(\vartheta^4) \end{aligned} \tag{47}$$

Hier erkennt man unmittelbar, dass die Korrekturglieder zweiter und dritter Ordnung (unterstrichen) dieselbe Grössenordnung haben. Man erkennt auch, dass sich die Näherungen (42) mit Einteilchenoperatoren genau dann ergeben, wenn man nur die Terme $\sim I_{\bar{x}\bar{y}}$ berücksichtigt und die Deviationsmomente gegenüber den Trägheitsmomenten vernachlässigt. Man vernachlässigt damit Glieder der Grössenordnung ϑ_i in (47), weshalb in (42) für die Kreuzrelation $[L_{\bar{x}}, \vartheta_y] = \frac{\hbar}{i} [\, \mathcal{O}(\vartheta) \,]$ herauskam. Bei der Näherung (43) mit maximal Zweiteilchenoperatoren werden nur noch Glieder der Grösse $\mathcal{O}(\vartheta^2)$ in (47) vernachlässigt. Jedoch erreicht man durch die Berücksichtigung von Dreiteilchenoperatoren bei der Winkelübersetzung eine Genauigkeitssteigerung auf $\mathcal{O}(\vartheta^4)$.

II. 4 Das Auftreten von Mehrteilchenkorrelationen. Konvergenzprobleme.

Der Näherungsausdruck (37) enthielt zwar über die inversen Operatoren (Trägheitsmomente) bereits Vielteilchenkorrelationen. Da aber praktische Rechnungen zeigten (siehe Tabelle 1), dass die Trägheitsmomente im wesentlichen diagonal sind, tragen sie zu Mehrteilchenkorrelationen praktisch nicht bei und es bleiben die Natafoperatoren, die bis zu Zweiteilchenkorrelationen führen. Man wird erwarten, dass die zunächst einmal die wichtigsten Terme sind, was sich auch tatsächlich in verhältnismässig grossen Diagonalbeiträgen zeigt (s. Kapitel IV).
Vergleicht man hierzu die in quadratischer Näherung entstehenden Terme (40, 41) so erkennt man, dass nunmehr bis zu Vierteilchenkorrelationen auftreten. Die Grösse dieser Terme lässt sich zur Zeit nur abschätzen, da es zu erheblichen numerischen Schwierigkeiten kommt, diese wirklich zu berechnen. Um sich dennoch eine Vorstellung der Grössenordnung zu machen wird z.B.

$$\langle \vartheta_x N_{\bar\eta\bar\xi}(N_{\bar\eta\bar\eta}-N_{\bar\xi\bar\xi})\rangle \approx \sqrt{\langle\vartheta_x^2\rangle\langle N_{\bar\eta\bar\xi}^2\rangle}\;\langle N_{\bar\eta\bar\eta}-N_{\bar\xi\bar\xi}\rangle$$

gesetzt. Bei Ne^{20} ergibt sich $0{,}51 \cdot \langle N_{\bar\eta\bar\xi}^2\rangle$,

was in dem betrachteten Term also einer Korrektur von maximal 51% entsprechen würde. Hieraus ersieht man, dass die höheren Näherungen noch wesentliche Beiträge liefern können. Da alle auftretenden Glieder von dieser Grössenordnung sind und sich natürlich gegeneinander wegheben können, ist es notwendig, im zweiten Näherungsschritt wirklich alle Terme vergleichbarer Grösse mitzunehmen. Man muss sich angesichts des erheblichen Mehraufwands die Frage stellen, inwieweit man bereits mit den Näherungen (37) die Physik quantitativ richtig beschreibt. Die Antwort ergibt sich aus der praktischen Erfahrung. Man erhält mit (37) wohl den Diagonaleffekt, jedoch sind nichtdiagonale Matrixelemente recht selten und klein bis auf wenige Ausnahmen. Deshalb gelingt es mit (37) schon recht gut, intrinsische Energien zu berechnen, jedoch kann man Wellenfunktionen aus den Schalenmodellvielteilchenfunktionen nicht erhalten. Dazu ist die weitergehende Näherung nötig, was sich auch noch aus einer anderen Überlegung ergibt.

Tabelle 1

Matrixelemente von $I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}$

Nr	E^*[hω]	Diagonal-element	Nichtdiagonalelemente, betragsmäßig $>3\cdot 10^{-4}\cdot \vert\langle I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}\rangle\vert$
1	0	44.51	-2.44, -2.44, 1.40, 1.40, 1.39, 1.39, 0.37, 0.37, 3.45, 3.45
2	0.575	43.54	0.37, -0.28, 0.26, 0.26, 0.37
3	0.575	43.54	- " -
4	0.749	42.53	keine
5	0.749	42.53	keine
6	0.749	42.53	keine
7	0.795	48.34	0.19, 0.32, -0.26, -0.26, -0.26, -0.26
8	0.795	48.34	- " -
9	0.944	47.33	keine
10	0.944	47.33	keine
11	0.944	47.33	keine

Matrixelemente von $I_{\bar{y}} - I_{\bar{y}}$

Nr	E^*	$\langle I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}\rangle$	Nichtdiagonalelemente, betragsmäßig $>3\cdot 10^{-4}\cdot \vert\langle I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}\rangle\vert$
1	0	-19.43	2.50, 2.50, -1.45, -1.45, -1.41, -1.41, -0.69, -0.69, -3.53, -3.53
2	0.575	-17.62	0.52, -0.49, -0.49, -0.69, -0.69
3	0.575	-17.62	- " -
4	0.749	-15.73	keine
5	0.749	-15.73	keine
6	0.749	-15.73	keine
7	0.795	-24.03	-0.35, -0.58, 0.49, 0.49, 0.49, 0.49
8	0.795	-24.03	- " -
9	0.944	-22.11	keine
10	0.944	-22.11	keine
11	0.944	-22.11	keine

Wie noch in (III.2) gezeigt wird, sind die spuriosen Anteile einer Schalenmodellvielteilchenfunktion ψ_{Ω}^{j} im wesentlichen in der Klasse $\Omega' = \Omega \pm 1$ zu finden, während T_{intr} (37,40) nur die Klasse $\{\psi_{\Omega}^{j}\}$ miteinander verbindet. Der Unterschied zwischen (37) und (40 , 41) besteht nun gerade darin, daß die Klasse $\{\psi_{\Omega\pm 1}^{j'}\}$ in (40 , 41) als Zwischenzustände steckt z.B.

$$\langle \psi_{\Omega}^{j_1} | \vartheta_x N_{\bar{y}\bar{z}} (N_{\bar{y}\bar{y}} - N_{\bar{z}\bar{z}}) | \psi_{\Omega}^{j_2} \rangle =$$

$$= \sum_{\substack{K = \{\psi_{\Omega\pm 1}^{j'}\}, \\ \nu = \{\psi_{\Omega\pm 2,\Omega}^{j_2'}\}}} \langle \psi_{\Omega}^{j_1} | \vartheta_x | K \rangle \langle K | N_{\bar{y}\bar{z}} | \psi_{\Omega'}^{\nu} \rangle \langle \psi_{\Omega'}^{\nu} | N_{\bar{y}\bar{y}} - N_{\bar{z}\bar{z}} | \psi_{\Omega}^{j_2} \rangle ,$$

wobei j,ν stellvertretend für alle nicht aufgeführten Quantenzahlen steht. Auch von daher wird man vermuten, daß durch Diagonalisierung in den Schalenmodellwellenfunktionen nur dann projezierte Funktionen der Art (26) erhalten werden, wenn man die Form (41, 42) für T_{intr} benutzt.

III. Die praktische Behandlung des Nilssonmodells[5)]

Waren die bisherigen Aussagen noch auf allgemeine axialsymmetrische Einteilchenpotentiale anwendbar, so sollen im folgenden nur noch Ergebnisse diskutiert werden, die aus dem Nilssonpotential (13) resultieren

$$H_N = \sum_i \frac{\underset{\sim}{p}_i^2}{2m} + V_N$$

mit

$$\omega_x^2 = \omega_y^2 = \left(1 + \tfrac{2}{3}\delta\right)\omega_o^2 \,, \qquad \omega_z^2 = \left(1 - \tfrac{4}{3}\delta\right)\omega_o^2$$

III.1 Die Beschränkung auf Zweiteilchenkorrelationen. Inverse Operatoren

Für die kinetische Energie des intrinsischen Hamiltonoperators wird die Näherung (37) verwandt. Mittels der Transformationsformeln (A1.1) und der einfachsten Winkelübersetzung (42) ergibt sich wegen $I_{\bar{x}\bar{y}} \approx 0$ für V_{intr} (11) analog (13)

$$\begin{aligned} V_{intr} &= V_N - V_{Koppl} - V_{rot} - W(\underset{\sim}{\bar{X}}^2) \\ &\approx \frac{m}{2}\left\{ \omega_x^2 (I_{\bar{x}} + I_{\bar{y}}) + \omega_z^2 I_{\bar{z}} - (\omega_z^2 - \omega_x^2)\left(\frac{I_{\bar{y}\bar{z}}^2}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} + \frac{I_{\bar{x}\bar{z}}^2}{I_{\bar{x}} - I_{\bar{z}}}\right)\right\} + \\ &\quad + C\,\vec{\ell}\cdot\vec{s} + D\,\vec{\ell}^{\,2} - \frac{mA}{2}\left\{\omega_x^2(\bar{X}^2 + \bar{Y}^2) + \omega_z^2 \bar{Z}^2\right\} \end{aligned} \tag{48}$$

Dabei wird die Bedeutung des durch die Transformation auftretenden Rotationsterms besonders deutlich, wenn man die inversen Operatoren durch ihre Erwartungswerte ersetzt, was eine recht gute Näherung darstellt.

$$-(\omega_z^2 - \omega_x^2)\left[\frac{I_{\bar{y}\bar{z}}^2}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} + \frac{I_{\bar{x}\bar{z}}^2}{I_{\bar{x}} - I_{\bar{z}}}\right] = (\omega_z^2 - \omega_x^2)\left[(I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}})\frac{I_{\bar{y}\bar{z}}^2}{(I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}})^2} + (I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}})\frac{I_{\bar{x}\bar{z}}^2}{(I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}})^2}\right] \tag{49}$$

$$\approx (\omega_z^2 - \omega_x^2)\langle I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}}\rangle(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2) = 2\delta\omega_o \langle I_{\bar{z}} - I_{\bar{y}}\rangle(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2) = V_{rot}(\vartheta^2)$$

Diese Form zeigt, daß in der Näherung (48) ein harmonisches Potential für die Eulerwinkel auftritt. Andererseits sucht man in (37) vergeblich nach einem entsprechenden kinetischen Anteil, der nur auf Eulerwinkel wirken würde. Dieser kinetische Anteil sollte nach (A1.16) in erster Näherung sein

$$T(\vartheta) = \frac{\lambda}{2}\left(L_x^2 + L_y^2\right) \approx \frac{\lambda}{2}\left(J_x^2 + J_y^2\right) \quad ,$$

wobei $\frac{\lambda}{2}$ zweckmäßig so verfügt, daß $\langle T(\vartheta)\rangle = \langle V_{rot}(\vartheta)\rangle$ ist (26f). Würde man für $\frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2\langle\Theta_1\rangle}$ setzen, wäre $\langle T(\vartheta)\rangle$ abhängig von der Deformation (siehe Tabelle 2) um einen Faktor 1,3 bis 2,5 größer als der Erwartungswert von

$$\frac{1}{2\Theta_1}\left\{(J_1 - J_1')^2 + (J_2 - J_2')^2\right\} \approx \frac{1}{2m}\left\{\frac{N_{\bar{y}\bar{z}}^2}{I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}} + \frac{N_{\bar{x}\bar{z}}^2}{I_{\bar{x}} + I_{\bar{z}}}\right\} \tag{50}$$

Daraus folgt, daß $J_A \sim J_A'$ ist und keinesfalls $J_A \gg J_A'$ angenommen werden darf. Da aber die Erwartungswerte von (50) nicht sehr schwanken (unter 20%) und Nichtdiagonalelemente i.a. klein sind, bei $\langle T(\vartheta)\rangle$ ebenfalls nur Schwankungen dieser Größenordnung auftreten, kann man aus H_N näherungsweise (Fehler von der Größe 30%) eine Rotation mit einem effektiven Trägheitsmoment

$$\langle\Theta_1\rangle_{eff} = \frac{1}{\lambda} \qquad \approx 1{,}3 \text{ bis } 2{,}5 \text{ mal } \langle\Theta_1\rangle$$

abspalten, um H_{intr} (37, 48) zu erhalten. Hierin ist wohl der Grund dafür zu suchen, daß das Nilssonmodell zu kleine Werte für $\langle\Theta_1\rangle$ liefert, andereseits die kollektive Beschreibung von Rotationen sehr wohl mit einem größeren Trägheitsmoment, das man sich aus den ersten 2^+-Niveaus bestimmen kann, angenähert nach dem I(I+1)-Gesetz möglich ist.

Einige Bemerkungen noch zur Behandlung der in (37) und (48) auftretenden inversen Operatoren. Da wir zur Berechnung von H_{intr} eine Matrixdarstellung benutzen wollen, ist es zweckmäßig, den

Tabelle 2

Erwartungswerte von $\frac{1}{2\langle\Theta_1\rangle}\langle J_x^2 + J_y^2\rangle$ und $\frac{1}{2}\frac{\langle N_{\bar{y}\bar{z}}^2 + N_{\bar{x}\bar{z}}^2\rangle}{\langle I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}\rangle}$

	$\frac{1}{2\langle\Theta_1\rangle}\langle J_x^2+J_y^2\rangle$ $[\hbar\omega_0]$	Deformation δ	$\frac{1}{2}\frac{\langle N_{\bar{y}\bar{z}}^2 + N_{\bar{x}\bar{z}}^2\rangle}{\langle I_{\bar{y}} + I_{\bar{z}}\rangle}$ $[\hbar\omega_0]$	
Ne^{20}	2.34	0.1	0.97	
	1.90	0.2	0.94	
	1.43	0.3	0.91	
	1.12	**0.4**	0.87	Grundzustands-deformation
	0.97	0.5	0.83	
	0.84	0.6	0.78	
	0.71	0.7	0.74	
Yb^{168}	6.15	0.075	0.98	
	2.43	0.15	0.95	
	1.52	**0.27**	0.93	Grundzustands-deformation
	1.43	0.30	0.92	
	1.23	0.45	0.88	
	1.07	0.60	0.85	

inversen Operator durch seine Matrix zu definieren

$$O \cdot O^{-1} = 1 \tag{51}$$

Aus dieser Definition ergibt sich unmittelbar ein Näherungsverfahren zur Berechnung der Matrixelemente. Aus (51) folgt nämlich

$$\sum_k O_{nk} O^{-1}_{km} = \delta_{nm}$$

und für $O_{nk} \ll O_{nn}, O_{kk}$, womit auch $O^{-1}_{km} \ll O^{-1}_{kk}, O^{-1}_{mm}$ ist (diese Annahmen sind äquivalent der Bedingung $\langle O^2 \rangle \approx \langle O \rangle^2$), erhält man

$$O_{nn} O^{-1}_{nm} + O_{nm} O^{-1}_{mm} \approx 0 \qquad O^{-1}_{nn} O_{nn} \approx 1 \tag{52}$$

also

$$O^{-1}_{nn} \approx \frac{1}{O_{nn}} \equiv X_{nn} \qquad O^{-1}_{nm} \approx - \frac{O_{nm}}{O_{nn} O_{mm}} \equiv X_{nm}$$

Nun geht man am besten iterativ weiter vor, wobei es sich gezeigt hat, daß schon ein Iterationsschritt die gewünschte relative Genauigkeit von einigen Prozent liefert. Dies liegt daran, daß nach Tabelle 1 Nichtdiagonalelemente der hier benutzten Operatoren klein sind. Man setzt

$$O^{-1} = X_0 + Z \qquad X_0 = (X_{nm})$$

Nach (51) folgt

$$\begin{aligned} O \cdot X_0 + O \cdot Z &= 1 \\ (O \cdot X_0 - 1) &= - O Z = R \quad , \end{aligned} \tag{53}$$

wobei R eine Restmatrix darstellt. Daraus rechnet sich Z aus

$$Z = -O^{-1} R \approx - X_0 R$$

Diese Ersetzung von O^{-1} durch X_0 im Korrekturterm soll nun gerade die Iterationsvorschrift bedeuten

$$\begin{aligned} Z^{(n)} &= - B^{(n-1)} \left[O \cdot B^{(n-1)} - 1 \right] \\ B^{(n)} &= B^{(n-1)} + Z^{(n)} \end{aligned} \tag{54}$$

wobei $B^{(n-1)}$ die (n-1)-te Näherung für O^{-1} ist. Die Konvergenz dieses Verfahrens ersieht man aus (54)

$$Z^{(n)} = Z^{(n-1)} - Z^{(n-1)}\left[O\left(B^{(n-1)} - Z^{(n-1)}\right) - 1\right] - B^{(n-1)} O Z^{(n-1)} \approx Z^{(n-1)} O Z^{(n-1)}$$

Man erkennt unmittelbar, daß man quadratische Konvergenz des Verfahrens hat, wenn man die Matrixelemente des Operators O so kalibriert, daß die Diagonalelemente von der Größenordnung 1 werden. Die Konvergenz wird schlechter, wenn man diese Normierung z.B. durch Herausziehen des betragsmäßig größten Diagonalelementes nicht vornimmt.

Es hat sich gezeigt, daß die Näherung (52) für die Operatoren $I_{\bar{x}}+I_{\bar{z}}$, $I_{\bar{y}}+I_{\bar{z}}$ schon sehr gut ist und (53) nur Veränderungen der Größenordnung 5% der Diagonalglieder bringt. Nichtdiagonalelemente bekommen zwar relativ größere Beiträge durch (53), da diese Matrixelemente aber i.a. ohnehin sehr klein sind, ist dies von geringer Bedeutung. Anders ist es bei den Operatoren $(I_{\bar{x}}-I_{\bar{z}})$, $(I_{\bar{x}}-I_{\bar{z}})^2$. Hier bringt die verbesserte Näherung (53) Zusätze 20 - 40%, wobei sich der starke Effekt in den Nichtdiagonalgliedern von $(I_{\bar{x}}-I_{\bar{z}})$ in starken Veränderungen der Diagonalglieder (bis 40%) von $(I_{\bar{x}}-I_{\bar{z}})^2$widerspiegelt. Dennoch reicht wegen der quadratischen Konvergenz des Verfahrens auch hier schon der erste Näherungsschritt (53) aus. Voraussetzung für die sinnvolle Anwendung der Iteration (53) ist es, ein halbwegs vollständiges Funktionensystem zur Verfügung zu haben.

Die Vollständigkeit läßt sich aber leicht in folgender Weise prüfen

$$\langle 0|\,(I_{\bar{z}} \pm I_{\bar{x}})^2\,|0\rangle = \sum_K \langle 0|\,(I_{\bar{z}} \pm I_{\bar{x}})|K\rangle\langle K|\,(I_{\bar{x}} \pm I_{\bar{z}})\,|0\rangle \quad ,$$

wobei wegen der durch $(I_{\bar{x}} \pm I_{\bar{z}})$ gegebenen Ω-Auswahlregeln für $|K\rangle$ nur Zustände zugelassen werden, für die $\Omega_0 - \Omega_K = 0, \pm 2$ ist.

III.2 Eine approximative Berechnung des die Rotationsoszillationen beschreibenden Anteils der Eigenfunktionen des intrinsischen Hamiltonoperators und des Nilsson-Hamiltonoperators.

Einige theoretische Beziehungen gestatten es, sich etwas detaillierte Vorstellungen über die Eigenfunktionen von H_{intr} (26) ebenso wie über die Vielteilchenwellenfunktionen des Nilssonmodells zu machen. Nach (A1.20) gilt

$$L_z \approx \mathcal{L}_z(\vartheta) + L_3' + O(\vartheta^2) \tag{55}$$

Man kann die Vielteilchenwellenfunktionen des Nilssonmodells sicherlich als Überlagerung der Funktionen des Typs (25), in guter Näherung aber auch von der Art (26) schreiben, da es sich um einen vollständigen Funktionensatz zur gleichen Randbedingung handelt.

$$\psi_{\Omega\alpha}(\underset{\sim}{\bar{x}}) = \sum_{m,M,j,K} a^{\Omega\alpha}_{mMjK}\, \phi_{mM}(\vartheta_i)\, \chi_{jK}(\xi_\nu)\cdot \Lambda_0(\underset{\sim}{\bar{X}}) \tag{56}$$

Mit (39) und (A1.21) ergibt sich

$$L_z\, \psi_{\Omega\alpha} = \Omega\, \psi_{\Omega\alpha} \approx \sum_{m,M,j,K} a^{\Omega\alpha}_{mMjK}\, (M+K)\, \phi_{mM}(\vartheta_j)\, \chi_{jK}(\xi_\nu)\cdot \Lambda_0(\underset{\sim}{\bar{X}})$$

In der Kleinwinkelnäherung (A1.17) folgt also wegen der linearen Unabhängigkeit

$$\Omega = M + K \tag{57}$$

Aus (57) ergibt die Gleichung

$$\Omega = \sum_{mMjK} \left| a^{\Omega\alpha}_{mMjK} \right|^2 (K+M) \qquad (58)$$

Eine weitere Relation in der Kleinwinkelnäherung ergibt sich aus der geometrischen Bedeutung der spuriosen Bewegung. Die spuriosen Rotationsoszillationen stellen nämlich eine in erster Näherung harmonische Oszillationsbewegung von Hilfssystem und intrinsischem System gegeneinander dar. Da nach (38) der Gesamtdrehimpuls eine gute Projektion auf die intrinsische 3-Achse hat, heißt dies, daß die Projektion des Gesamtdrehimpulses auf die Hilfssystem $\bar{z}$-Achse (wieder in erster Näherung) harmonisch um den Wert $\Omega = K$ schwankt. Die Komponenten sind also gleichwahrscheinlich beigemischt, woraus folgt

$$\left| a^{\Omega\alpha}_{m,M,j,\Omega-M} \right| = \left| a^{\Omega\alpha}_{m,-M,j,\Omega+M} \right| \qquad (59)$$

Mittels (57) erhält man daraus

$$\left| a^{\Omega\alpha}_{m,\Omega-K,jK} \right| = \left| a^{\Omega\alpha}_{m,-\Omega+K,j,2\Omega-K} \right| \qquad (60)$$

Aus den Gleichungen (59) und (60) ergeben sich für $\Omega = 0$ die beiden Spezialfälle

$$\left| a^{\Omega\alpha}_{n,M,j,-M} \right| = \left| a^{\Omega\alpha}_{n,-M,j,M} \right|$$

und (61)

$$\left| a^{\Omega\alpha}_{n,K,j,-K} \right| = \left| a^{\Omega\alpha}_{n,-K,j,K} \right|$$

Die soeben abgeleiteten Symmetrien in den Entwicklungskoeffizienten basieren ganz wesentlich auf der Kleinwinkelnäherung und sind, wie man in (55) und (58) erkennt bis auf Korrekturglieder in ϑ^2 gültig. Da aber $\langle\vartheta^2\rangle \leq (10^{\circ})^2$ in allen bisher berechneten Fällen war, heißt dies, daß die Relationen (60) und (61) einen maximalen Fehler von 5,5% haben können.

Weitere wesentliche und exakte Schlußfolgerungen lassen sich aus der Untersuchung $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 + L_y^2 \rangle$ gewinnen. Mittels (A1.19) und (A1.20) erhält man

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vartheta_x} \qquad L_y = \frac{\hbar}{i}\cos\vartheta_x \frac{\partial}{\partial\vartheta_y} + \frac{\hbar}{i}\sin\vartheta_x \operatorname{tg}\vartheta_y \frac{\partial}{\partial\vartheta_x} - \frac{\sin\vartheta_x}{\cos\vartheta_y} L_3' \tag{62}$$

Schreibt man für

$$\langle\Omega|\vec{L}^2|\Omega\rangle = \frac{1}{2}\sum_j \langle\Omega|L_+|j\Omega-1\rangle\langle j\Omega-1|L_-|\Omega\rangle + \frac{1}{2}\sum_{j'}\langle\Omega|L_-|j'\Omega+1\rangle\langle j'\Omega+1|L_+|\Omega\rangle ,$$

so erkennt man, daß in den Zuständen $|j\Omega-1\rangle, |j'\Omega+1\rangle$ dieselben inneren Zustände $\chi_{jK}(\xi_\nu)$ wie im Zustand $|\Omega\rangle$ enthalten sein müssen, da sonst die Überlappintegrale über die intrinsischen Zustände (man denke sich $|j\Omega-1\rangle, |j'\Omega+1\rangle, |\Omega\rangle$ in der Form (56) geschrieben) Null würden. Diese Aussagen sind exakt und an keine Näherung gebunden. Aus der Größe der Erwartungswerte von L^2 muß man schließen, daß die Klasse der $\Omega\pm1$ Zustände tatsächlich dieselben

intrinsischen Zustände stark enthält, wie sie in der Klasse der Ω -Zustände als Hauptkomponenten auftreten. Eine nähere Untersuchung am Ne^{20} ergab, daß im wesentlichen nur wenige große Matrixelemente $\langle \Omega | L_\pm | j\Omega \pm 1 \rangle$ auftreten und daß die mit (62) berechneten Erwartungswerte sehr gut mit den direkt berechneten Werten $\langle \Omega | L^2 | \Omega \rangle$ tief liegender Zustände übereinstimmen. (63)

Dieses Ergebnis bedeutet zweierlei. Einmal heißt dies, daß ein zu einem Zustand $|\Omega\rangle$ spurioser Zustand erst einmal in der Klasse der $|\Omega \pm 1\rangle$ -Zustände zu suchen ist. Dabei soll spurios heißen, daß dieselbe intrinsische Wellenfunktion, aber multipliziert mit anderen kollektiven Wellenfunktionen in der Form (56) mit nicht vernachlässigbarer Stärke in den Zuständen $|\Omega\rangle$, $|\Omega \pm 1\rangle$ auftritt. (63) ist aber darüber hinaus ein Test für die Vollständigkeit der gewählten Basis. Nimmt man nach der Vorschrift (18) die $|\Omega \pm 1\rangle$ Zustände zur Ergänzung der $|\Omega\rangle$ -Zustände mit hinzu, so kann man hoffen, einen Funktionensatz gefunden zu haben, mit dem sich die spuriosen Zustände herausprojizieren lassen. Leider führt die Berechnung von Matrixelementen

$$\langle \Omega | H_{intr} L_\pm | \Omega \mp 1 \rangle$$

auch dann schon zu Dreiteilchenoperatoren, wenn man die Näherung (37) für H_{intr} benutzt, so daß dies bisher nicht durchgeführt werden konnte.

Eine Anmerkung sei noch hinzugefügt. Ersetzt man $\vec{L}$ durch $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, wobei $\vec{S} = \sum_{i=1}^{A} \vec{s}_i$ den Spin der Teilchen bezeichnet, ändern sich die gemachten Aussagen nicht, da der Spin eine vom Impuls unabhängige Größe darstellt und deshalb mit Orts- und Impulskomponenten vertauschbar ist. Man ersetze in allen Beziehungen $\vec{L}$ formal durch $\vec{J}$.

Mit Hilfe der Beziehungen (56), (60, 61) und der aus (62) gefolgerten Aussagen ergibt sich ein Näherungsansatz für die Vielteilchenwellenfunktionen des Nilssonmodells

$$\Psi_{\Omega\alpha}(\underset{\sim}{x}) = a_0 \phi_{00}(\vartheta) \chi_{j\Omega}(\xi_\nu) + a_1 \phi_{01}(\vartheta) \chi_{j\Omega-1}(\xi_\nu) \tag{64}$$

$$+ a_{-1} \phi_{0-1}(\vartheta) \chi_{j\Omega+1}(\xi_\nu) + a_2 \phi_{10}(\vartheta) \chi_{j\Omega}(\xi_\nu) \text{ + höhere Glieder}$$

Dabei sollen die $\phi_{nM}(\vartheta)$ Eigenfunktionen des zweidimensionalen Oszillators sein

$$H(\vartheta) = \frac{\lambda}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_y^2}\right) + \frac{\lambda}{2}\Omega^2(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2)$$

$$\approx \frac{\lambda}{2}\left(J_x^2 + J_y^2\right) + \frac{\lambda}{2}\Omega^2\left(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2\right) \qquad (65)$$

Dieser Oszillator steckt ja nach den Diskussionen (50) näherungsweise im Nilssonmodell, so daß dessen Eigenfunktionen sich für die Darstellung (64) eignen sollten. In (65) ist zu bemerken, daß die potentielle Energie in sehr guter Näherung aus der Transformation folgte (49) und deshalb wohl bestimmt ist. Da, wie erwähnt, λ so gewählt wurde, daß $\frac{\lambda}{2}\langle J_x^2 + J_y^2\rangle = \frac{\lambda}{2}\Omega^2\langle\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2\rangle = V(\vartheta)$ wird, ist der Hamiltonoperator H(ϑ) keineswegs so willkürlich, wie es erscheinen mochte, sondern ist geeignet, eine echte Klassifikation der spuriosen Anregung zu geben.
Aus (65) folgen mit (60) die Beziehungen (Energien in $\hbar\tilde{\omega} = \lambda\Omega$)

$$E_{rot} = T(\vartheta) + V(\vartheta) \approx a_0^2 + 2(a_1^2 + a_{-1}^2) + 3a_2^2 = a_0^2 + 4a_1^2 + 3a_2^2$$

$$\Delta E_{rot}^2 = T(\vartheta) - V(\vartheta) = 2a_0 a_2$$

$$1 \approx a_0^2 + a_1^2 + a_{-1}^2 + a_2^2 \approx a_0^2 + 2a_1^2 + a_2^2 \quad , \qquad (66)$$

woraus sich ergibt

$$a_0^2 = \frac{2 - E_{rot}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(2 - E_{rot})^2 + \Delta E_{rot}^2} \quad , \quad a_0 \geq 0$$

$$a_2 = \frac{\Delta E_{rot}}{2a_0}$$

$$a_1^2 = a_{-1}^2 = \frac{1}{2}\left(1 - a_0^2 - a_2^2\right)$$

Es gelingt leider nicht, das relative Vorzeichen von a_1 und a_{-1} bezüglich a_0 festzulegen. Dazu muß man nichtdiagonale Matrixelemente von

$$\langle j\Omega | \vec{J}^2 | j'\Omega \rangle$$

betrachten. Diese können einmal direkt ausgerechnet werden, zum anderen aber aus den Koeffizienten (66) unter Benutzung der Wellenfunktionen (64) berechnet werden. Da man dabei berücksichtigen muß, daß die intrinsischen Wellenfunktionen χ_{jK} , $\chi_{j'K}$ orthogonal sein können, ist das Ganze etwas ein Puzzlespiel, doch gelingt es tatsächlich mit den in Tabelle 4 angegebenen Koeffizienten, nichtdiagonale Matrixelemente auf 4% der diagonalen $\langle \vec{J}^2 \rangle$ anzugeben, einschließlich des Vorzeichens. Dabei zeigt sich auch, daß die Superposition im allgemeinen eindeutig ist, d.h. dieselben Matrixelemente nicht durch verschiedene Kombinationen der a_0, a_1, a_2 angegeben werden können.

Von B. Fink [4] wurde eine andere Entwicklung für (64) mit der Begründung postuliert, daß in den Nilssonwellenfunktionen im wesentlichen nur die Komponenten $K = \Omega$ enthalten sind. Ein analoges Gleichungssystem für (66) führte dann zu Koeffizienten a_0, a_2, a_4. Die erste Diskrepanz war, daß es nicht gelang, Nichtdiagonalelemente von $\vec{J}^2$ in richtiger Größenordnung und mit den Vorzeichen daraus zu berechnen. Der Hauptwiderspruch trat jedoch zu (62) auf, denn es folgte $\langle J^2 \rangle = 0$. Dies steht im krassen Widerspruch zur Größe der $\langle J^2 \rangle$ und da (62) überdies eine exakte Schlußfolgerung (die einzige exakte über den Aufbau der Nilssonwellenfunktionen) erlaubt, folgt daraus, daß dieser Ansatz für Nilssonwellenfunktionen nicht richtig war. Erst auf Eigenfunktionen von H_{intr} der Art (25) bis (26) ist das von B. Fink vorgeschlagene Verfahren anzuwenden, da es dann klar ist, daß ein einziges $\chi_{jK}(\xi_\nu)$ herausprojiziert ist.

Die in Tabelle 4 aufgeführten Koeffizienten a_0, a_1, a_2 für $I = 0^+$ Zustände des Ne^{20} zeigen einige spuriose Zustände, d.h. Zustände mit $a_0^2 < 2\, a_1^2$. Diese Zustände werden als spuriose Zustände zu solchen mit $\Omega \pm 1$ interpretiert.

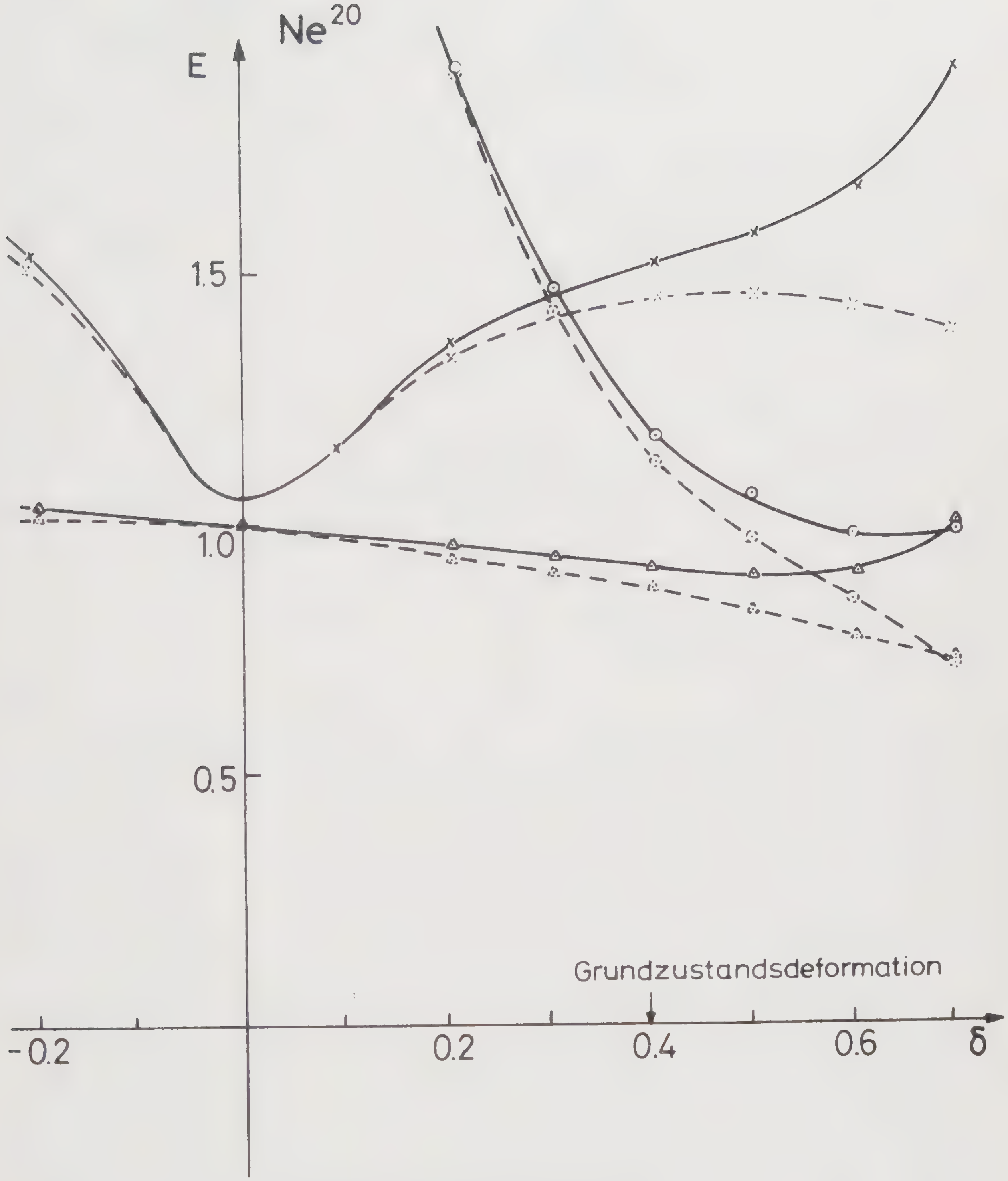
IV. 1 Der Einfluss der spuriosen Anteile in den Vielteilchenwellenfunktionen des Nilssonmodells auf die Potential-Energieflächen.

Mit Hilfe der Näherung (37), (48) wurde der Erwartungswert von $\mathcal{H}_{intr}$ im Schalenmodellgrundzustand bei verschiedenen Deformationen berechnet. Der Schalenmodellgrundzustand von H_N als Slaterdeterminante bis zur Fermikante stellt zwar wiederum nur eine Näherung für den Grundzustand von $\mathcal{H}_{intr}$ dar, aber wie wir in (IV.4) sehen werden, ändert eine Diagonalisierung die Grundzustandsenergie nicht mehr stark ($\sim 0.05\ \hbar\omega_0$) ab, so dass dieses einfache Vorgehen gerechtfertigt erscheint.

$$\langle 0_s | \mathcal{H}_{intr} | 0_s \rangle = \langle 0_s | T - \frac{P^2}{2Am} - \frac{1}{2m} \left\{ \frac{N_{\eta\zeta}^2}{I_\eta + I_\zeta} + \frac{N_{\xi\zeta}^2}{I_\xi + I_\zeta} \right\} + V_N - m\delta\omega_0^2 \left\{ \frac{I_{\eta\zeta}^2}{I_\zeta - I_\eta} + \frac{I_{\xi\zeta}^2}{I_\zeta - I_\xi} \right\} - W(\bar{X}^2) | 0_s \rangle \tag{67}$$

Das Ergebnis für Ne^{20} und Yb^{168} ist in den Figuren 1 und 2 aufgeführt. Man erkennt, dass die in (I.4) diskutierte Asymptotik sich schon sehr gut andeutet, wenn man die gestrichelten Linien betrachtet, die die Energien in $\hbar\omega_0$ angeben. Es muss dazu gesagt werden, dass die asymptotischen Fälle verschwindender und unendlich grosser Deformation natürlich nicht gerechnet werden können, da im ersten Fall die Kleinwinkelnäherung zusammenbricht (vgl. A 2.8), im anderen Fall die Schalenmischung so beträchtlich wird, dass die Ergebnisse mit Fehlern behaftet sind. Dass sich die Kurven für $\sum_B \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B}$ und $\frac{\bar{J}^2}{2\Theta}$, in Fig.1 für $\delta = 0.7$ kreuzen, obwohl sie nach (28) nur asymptotisch aufeinander zulaufen sollten, liegt jedoch an etwas anderem. Der in (33) linear in $N_{\alpha\beta}$ gehende Term ist in (37) einmal wegen der N-Auswahlregel $\Delta N = \pm 2$ (N = Hauptquantenzahl eines Oszillatorzustandes) weggelassen worden. Zum anderen, weil er als Einteilchenoperator zunächst gegen den Zweiteilchenoperator vernachlässigbar ist. Jedoch ist in stark deformierten Zuständen die N-Auswahl wegen der grossen Schalenmischung nicht mehr wesentlich, während sie in fast sphärischen Zuständen zum Verschwinden der Matrixelemente von $N_{\alpha\beta}$ führt.

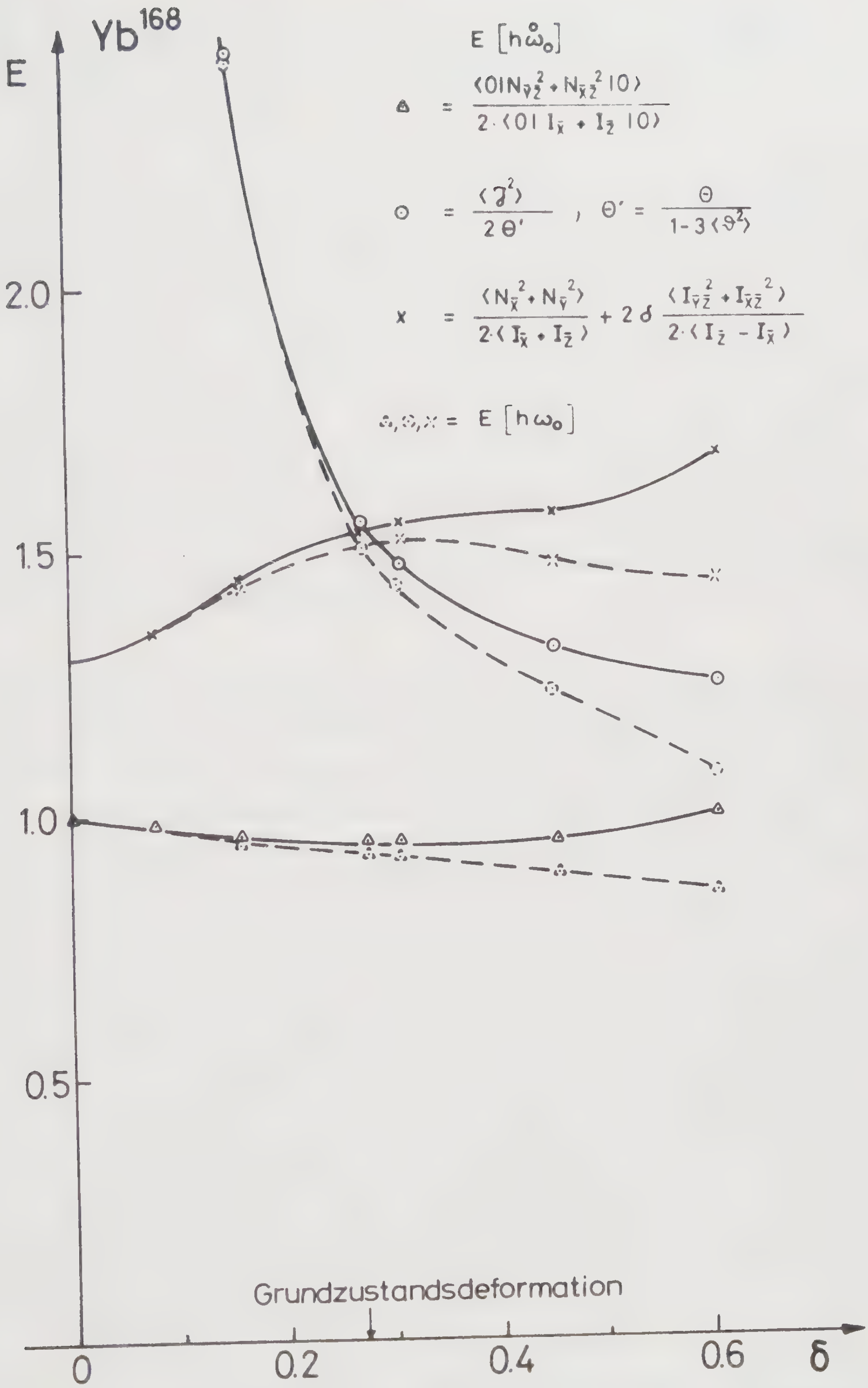
Es sollte nach (28) für $\delta = \delta_\infty$ der Term $\sum_B \frac{(J_B - J_B')^2}{2\Theta_B}$ die Energie $\hbar\omega_0/2$ liefern, jedoch liegen die Punkte bei Ne^{20} für $\delta = 0.6, 0.7$ und bei Yb^{168} für $\delta = 0.6$ für den entsprechenden Ausdruck $\frac{\langle 0 | N_{\eta\zeta}^2 + N_{\xi\zeta}^2 | 0 \rangle}{\langle 0 | I_\zeta + I_\xi | 0 \rangle}$ etwas zu hoch.



Figur 1

<u>Zu den Figuren 1 und 2:</u>

Spuriose Energien des Kopplungstermes (Natafterm), des Rotationstermes und der Summe von Kopplungs- und potentiellem Rotationsterm


E
Yb^{168}
$E\,[\hbar\overset{\circ}{\omega}_0]$
$\triangle = \dfrac{\langle 0| N_{\bar y \bar z}^2 + N_{\bar x \bar z}^2 |0\rangle}{2\cdot\langle 0| I_{\bar x} + I_{\bar z} |0\rangle}$
$\odot = \dfrac{\langle \mathcal{J}^2\rangle}{2\Theta'}\,,\quad \Theta' = \dfrac{\Theta}{1-3\langle\vartheta^2\rangle}$
$\times = \dfrac{\langle N_{\bar x}^2 + N_{\bar y}^2\rangle}{2\cdot\langle I_{\bar x} + I_{\bar z}\rangle} + 2\delta\,\dfrac{\langle I_{\bar y \bar z}^2 + I_{\bar x \bar z}^2\rangle}{2\cdot\langle I_{\bar z} - I_{\bar x}\rangle}$
$\triangle, \odot, \times = E\,[\hbar\omega_0]$
2.0
1.5
1.0
0.5
Grundzustandsdeformation
0
0.2
0.4
0.6
δ

Figur 2

Beachtet man, dass in (33) der Term proportional $N_{\alpha\beta}$ abgezogen wird, sieht man, dass bei diesen hohen Deformationen sein Einfluss nicht mehr vernachlässigbar ist.

Im glaubhaften Bereich zeigt sich aber bereits, dass die gesamte spuriose Korrektur zum Schalenmodellgrundzustand in Einheiten von $\hbar\omega_0$ in beiden Fällen in der Nähe der Grundzustandsdeformation ein Maximum annimmt und dort sehr flach verläuft ($\times$ Punkte in den Zeichnungen Fig.1 und 2), während die ausgezogene Kurve (mit Volumenerhaltung in Einheiten $\hbar\mathring{\omega}_0$) dieses Extremum nicht zeigt. Nun legen aber gerade die Überlegungen, die zum Zweizentren-Nilssonmodell führten, nahe, die Volumenerhaltungsvorschrift des Nilssonmodells nur für kleine Deformationen zu glauben, wo sie aber ohnehin belanglos ($< 4\%$) ist. Der gestrichelten Kurve kommt also der grössere physikalische Wahrheitsgehalt zu.

Daraus lassen sich folgende Folgerungen für die Potentialenergieflächen[6] ziehen. In der Umgebung der Grundzustandsdeformation des deformierten Kernes, insbesondere zu grösseren Deformationen hin, verläuft die Korrekturkurve flach, so dass das mit dem Nilssonmodell ausgerechnete Grundzustandsminimum etwa an derselben Stelle liegenbleibt. Auch die Krümmung der Potentialenergiefläche am Minimum ändert sich nur wenig, der Verlauf zur Deformation $\delta = 0$ (68) hin, die in allen Rechnungen als Bezugsmaximum genommen wird, aber ändert sich um 0.4 bis 0.2 $\hbar\omega_0$ d.h. bei mittelschweren deformierten Kernen z.B. YB^{168} beträgt die Änderung $0.2\hbar\omega_0 = 1{,}5$ MeV. Diese grosse Energie ist vergleichbar mit der Tiefe des deformierten Minimums, so dass durch die Korrektur auf spuriose Anteile die Potentialenergiefläche in diesem Bereich stark verändert wird. U.z. in der Art, dass das deformierte Minimum 1,5 MeV tiefer wird, wenn man als Bezugspunkt die Deformation $\delta = 0$ nimmt, da die spuriosen Energien in (67) abgezogen werden.

Inwieweit eine Paarkraftrechnung, wie sie üblicherweise zur Erstellung der Potentialenergieflächen herangezogen wird, die in (68)

diskutierten Korrekturen bereits inplizit enthält, ist bisher nicht bekannt und ist auch nicht so einfach zu untersuchen (siehe IV.3)

Schliesslich sei im Zusammenhang mit den Potentialenergieflächen noch auf eine wesentliche Schwierigkeit hingewiesen. Es handelt sich um die Frage, ob die Energie als Funktion der Potentialdeformation δ E (δ) oder als Funktion der durch die Wellenfunktionen bestimmten Massendeformation ß E (ß) darzustellen ist. Beide Deformationsparameter stimmen nur für die Grundzustandsdeformation[7] überein δ_o=ß$_o$ und weichen abseits davon nicht unerheblich voneinander ab. Mittels der in (A 2.7) angegebenen Relation sind in (A 2.9) einige typische Werte für Ne^{20} ausgerechnet. Unter Benutzung von (A 2.5) lassen sich auch noch verschiedene Annahmen über die Massengestalt des Kernes ineinander umrechnen, solange die Deformationen klein sind.

Um die Diskrepanz zwischen Massendeformation und Potentialdeformation zu überwinden, könnte man analog einem bei Hartree-Fock Rechnungen angewandten Verfahren vorgehen und die Grundzustandsenergie für jede Deformation so bestimmen, dass die über das Quadrupolmoment berechnete Massendeformation gleich der Potentialdeformation wird, was einer Variation

$$\delta \langle 0 | H_{int} - \lambda Q | 0 \rangle = 0 \qquad Q = r'^2 Y_{20}(\theta', \varphi')$$

entspräche. Inwieweit dieses Vorgehen, die Nilssonparameter zu variieren, jedoch sinnvoll ist, bleibt dahingestellt, da man mit (67) unter Berücksichtigung der vollen potentiellen Energie das Nilssonpotential ohnehin als ein äusseres Potential auffasst und nicht als ein selbstkonsistentes im Sinne eines Hartree-Fock-Einteilchenpotentials zu interpretieren ist. Dieses Problem tauchte in Zusammenhang mit der spuriosen Korrektur hier auf, konnte aber nicht weiter verfolgt werden.

IV.2 Die zunehmende Spuriosität der Vielteilchenfunktionen mit wachsender Massenzahl bei festgehaltener Deformation. Konsequenzen für Spektren von ug-Kernen.

Untersucht man nach dem Verfahren (66) die Grundzustände von Ne^{20} und Yb^{168} bei derselben Deformation δ_o, so sieht man die erstaunliche Tatsache, dass bei dem weitaus schwereren Yb^{168} die Rotationsspuriositäten wesentlich stärker sind als bei Ne^{20}. Dieselbe Untersuchung über die Schwerpunktsspuriosität hatte wie erwartet ergeben, dass der Grundzustand des schwereren Yb^{168} mit sehr guter Genauigkeit nur Grundzustandsspuriosität enthält, in unserer Betrachtungsweise als reiner intrinsischer Zustand bezüglich Schwerpunktsbewegung anzusehen ist. Dieses fundamental unterschiedliche Verhalten von spuriosen Schwerpunkts- und Rotationsanteilen hat erhebliche Konsequenzen für Schalenmodellrechnungen und es erscheint deshalb nicht mehr ganz so erstaunlich, dass die energetischen Beiträge der spuriosen Rotationsbewegung solch grossen Einfluss auf die Grundzustandsenergie haben, wie in (Fig.1, Fig.2) aufgezeigt.

In (Tabelle 3) sind die Koeffizienten a_o, a_1, a_2 von Yb denen von Ne^{20} gegenübergestellt.

Diese erstaunliche Abhängigkeit der Rotationsspuriositäten von der Massenzahl A lässt sich qualitativ verstehen. Nach (A 2.1 und A 2.2) ergibt sich für

$$\langle \vartheta^2 \rangle \approx \frac{\langle I_{xz}^2 \rangle}{\langle (I_x - I_z)^2 \rangle} \sim \frac{R_o^2}{R_o^5} = \frac{1}{R_o^3} \sim \frac{1}{A}$$

Anderseits geht die Niveaudichte in dem oszillatorähnlichen Nilssonpotential in erster Näherung proportional N^2 (N = Hauptquantenzahl)

Tabelle 3

Gegenüberstellung der Koeffizienten a_o, a_1, a_2 einiger Zustände von Yb^{168}, Yb^{169}, Ne^{2o}

Zustand	E* MeV	a_o	a_o^2	a_1	a_1^2	a_2	a_2^2
$\vert 0_s\rangle_{Ne^{20}}$	0	0.942	0.887	0.237	0.056	0.0	0.0
$\vert 0_s\rangle_{Yb^{168}}$	0	0.800	0.64	0.425	0.180	0.0	0.0
$\vert 7/2^+_s\rangle_{Yb^{169}}$	0	0.795	0.63	0.430	0.185	0.0	0.0
$\vert 9/2^+_s\rangle_{Yb^{169}}$	1,58	0.694	0.48	0.505	0.255	0.084	0.007 (S)
$\vert 1/2^-_s\rangle_{Yb^{169}}$	2.78	0.655	0.43	0.515	0.265	0.192	0.037 (S)

Aus rechentechnischen Gründen wurden aus dem ug-Spektrum speziell einmal nur Zustände herausgesucht, die man im Experiment nicht findet, und man erkennt deutlich, dass es sich hier um spuriose Zustände handelt.

Index s = Schalenmodellzustand

S = spurioser Zustand

Da der mittlere Wert des Drehimpulses $\overline{J}$ wiederum grob mit N ansteigt, erkennt man unmittelbar, dass eine mittlere Dichte $\varrho(J^2)$ mit einer höheren Potenz von A ansteigt, so dass

$$\sqrt{\langle \vec{\vartheta}^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle \vec{J}^2 \rangle} \sim A^{\alpha} \cdot \hbar \qquad , \quad \alpha > 0 \tag{69}$$

ist. Diese Aussage ist aber völlig äquivalent dem , dass E_{rot} in Einheiten von $\hbar\tilde{\omega}$ mit wachsendem A ansteigt, wie es auch tatsächlich beobachtet wird. Genauere Aussagen lassen sich aus der halbklassischen Überlegung (69) nicht gewinnen, da man bei der quantenmechanischen Rechnung erkennt, dass bei schweren Kernen der Austauschterm sehr gross, vergleichbar mit dem Direktterm, wird.

Abschliessend seien kurz die Ergebnisse in den Tabellen 3, 4 diskutiert. Man erkennt im Niederenergiespektrum bereits unter den unterhalb 10 MeV liegenden 0^+-Zuständen solche, die als spurios zu interpretieren sind, womit man zu einer vorzüglichen Übereinstimmung mit dem Experiment kommt, ohne dass man erst Restwechselwirkungsrechnungen anstellen muss (siehe IV.4). Nun können zweifellos 0^+- Zustände starke kollektive Eigenschaften zeigen (sie können Vibrationszustände sein), so dass es nicht gar zu verwunderlich ist, darunter spuriose zu finden. Erstaunlich bleibt allerdings, dass man so viele bereits im Niederenergiebereich bis etwa Anregungsenergien von $\hbar\omega_0$ findet. Besonders überraschend ist jedoch die Untersuchung der ug-Isotope des Yb, denn wie (Tabelle 3) zeigt, gibt es Einteilchenzustände bei relativ niedriger Anregungsenergie, die bereits als spurios bezeichnet werden müssen und im Experiment auch tatsächlich nicht gefunden werden.

Tabelle 4

Koeffizienten a_o, a_1, a_2 für $\Omega = 0^+$-Zustände des Ne^{20}

Nr.	$E^*[\hbar\omega_o]$	a_o	a_o^2	a_1	a_1^2	a_2	a_2^2	
1	0	0.942	0.887	0.237	0.056	0.0	0.0	
2	0.575	0.862	0.743	0.354	0.125	-0.079	0.006	
3	0.575	0.862	0.743	0.354	0.125	-0.079	0.006	
4	0.749	0.841	0.707	0.356	0.127	-0.197	0.039	
5	0.749	0.667	0.445	0.515	0.266	-0.153	0.023	S
6	0.749	0.546	0.299	0.588	0.345	-0.103	0.011	S
7	0.795	0.853	0.727	0.336	0.113	0.216	0.047	
8	0.795	0.853	0.727	0.336	0.113	0.216	0.047	
9	0.944	0.895	0.800	0.303	0.097	0.071	0.005	
10	0.944	0.900	0.811	0.303	0.092	0.071	0.005	
11	0.944	0.895	0.800	0.311	0.097	0.074	0.005	
12	0.949	0.597	0.357	0.559	0.312	-0.133	0.018	S
13	0.949	0.597	0.357	0.559	0.312	-0.133	0.018	S
14	0.962	0.794	0.631	0.412	0.169	-0.173	0.03	
15	0.962	0.794	0.631	0.412	0.169	-0.173	0.03	
16	1.145	0.877	0.769	0.333	0.111	0.096	0.009	
17	1.145	0.877	0.769	0.333	0.111	0.096	0.009	
18	1.149	0.645	0.416	0.528	0.279	-0.161	0.026	S
19	1.149	0.752	0.566	0.445	0.198	-0.198	0.039	(S)
20	1.149	0.794	0.630	0.415	0.172	-0.159	0.025	
21	1.150	0.724	0.525	0.418	0.175	-0.354	0.125	(S)
22	1.150	0.724	0.252	0.418	0.175	-0.354	0.125	(S)

S = Spuriose Zustände

(S) = Fast spuriose Zustände

$\hbar\omega_o$ = 15.0 MeV bzw. 13.5 MeV[12)]

Diese Anregungszustände des Einteilchennilssonmodells müssen also zu intrinsischen Zuständen $K = \Omega_{N} \pm 1$ (energetisch ziemlich entartet) gehören und können deshalb nur experimentellen Zuständen mit $K_{exp} = \Omega_{N} \pm 1$ zugeordnet werden. Da aber wie in (IV.4) am Ne^{20} gezeigt wird, eine Diagonalisierung gerade diese spuriosen Zustände stark verändert (i.a. absenkt), kann ohne Ausführung des Projektionsverfahrens nicht angegeben werden, wie sich diese Zustände energetisch verschieben.

Zusammenfassend kann man sagen, dass gerade bei schwereren deformierten Kernen ein aus Vielteilchenzuständen des Nilssonmodells aufgebautes Anregungsspektrum nur einen sehr groben Anhalt für das tatsächliche experimentelle Spektrum bieten wird, da die Zustände mit starken Rotationsspuriositäten behaftet sind und zum Teil sogar gänzlich spurios sind.

IV. 3 Die Projektionswirkung von Restwechselwirkungsrechnungen

Eine Restwechselwirkung ist definiert durch

$$V_{rest} = \sum_{i<j}^{A} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) - \sum_{j=1}^{A} S_j(\vec{r}_j) \quad , \tag{70}$$

wobei $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ das rotations- und translationsinvariante Vielteilchenpotential (es seien nur Zweikörperkräfte angenommen) darstellt und man $\sum_j S_j$ im Sinne einer Hartree-Fock Rechnung als ein mittleres Einteilchenpotential des Potentials $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ auffasst: Für ein Teilchen j wird über alle anderen Teilchen unterhalb der Fermikante summiert, seine Bewegung somit durch $\sum_j S_j$ so beschrieben, als sehe es ein durch alle anderen Teilchen aufgebautes mittleres Potential. Durch $\sum_j S_j$ werden alle langreichweitigen Anteile der Zweikörper-Wechselwirkung erfasst.

Man geht nun so vor, dass man die Erfolge von Schalenmodellrechnungen dahin deutet, dass das Schalenmodell V_S eine gute Approximation für die felderzeugenden Anteile der Wechselwirkung V darstellt.

$$V_S = \sum_j V_N(\vec{r}_j) \approx \sum_j S_j \tag{71}$$

Gelingt es nun mit einem Ansatz für $\sum_{i<j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ das mittlere Potential V_S gut zu reproduzieren, glaubt man ein geeignetes V_{rest} angeben zu können. Man kann dann aber noch weiter schliessen, dass man sogar einen ziemlich realistischen Ansatz für $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ gefunden hat, wenn man gewisse Kenntnisse über die Zweikörperkraft eingebaut hat. Ein solcher Ansatz wurde von Gillet[8] angepasst

$$V_{approx}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = V_0 \, e^{-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{\mu^2}} \left[a_0 + a_\sigma \sigma_i \sigma_j + a_\tau \tau_i \tau_j + a_{\sigma\tau} (\sigma_i \sigma_j)(\tau_i \tau_j) \right] \tag{72}$$

wobei μ, V_0, a_0, a_σ, a_τ, $a_{\sigma\tau}$ Konstanten sind, Tensoranteile völlig und Hard-core-Anteile weitgehend vernachlässigt sind. Mit diesem

Ansatz für V ($\vec{r}_i - \vec{r}_j$) gelingt es beim Ne^{20} sehr gut, das Nilssonpotential für diesen Kern $V_N(\vec{r}_j)$ zu reproduzieren. Bei schweren Kernen versagt dies mit (72).

Diagonalisiert man nun (72) in einer Vielteilchen-Nilssonbasis, so ist nach (38) klar, dass die Eigenzustände die Symmetrieeigenschaften von V ($\vec{r}_i - r_j$) haben müssen. Das ist aber nur möglich, wenn sie die Form

$$\psi_\Omega = \Lambda_0(\underset{\sim}{X}) \cdot \phi_0(\vartheta_j) \cdot \chi_\Omega(\xi_\nu) \tag{73}$$

haben, denn dann führt eine Translation und Rotation wieder zu einem Ausdruck (73) nun eben in X', ϑ_j', was aber weder Energien noch Überlappintegrale in diesen spuriosen Anteilen verändert, da es die Grundzustandsfunktionen sind. Die Diagonalisierung des translations- und rotationsinvarianten Potentials $\sum_{i<j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ projiziert also die in den Schalenmodellzuständen enthaltenen Spuriositäten heraus. U.z. exakt, wenn man $\sum_j S_j(\vec{r}_j)$ mittels (72) berechnet und in guter Näherung, wenn man die Beziehung (71) ausnutzt. Es ist lediglich eine praktische Frage, wie gross die Basis gewählt werden muss, um den Projektionseffekt zu erzielen. Unbefriedigend ist die Vielzahl der neu einzuführenden Parameter, und es ist völlig offen, ob (72) wirklich einen realistischen Ansatz für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung darstellt und ob es nicht nur so ist, dass das Schalenmodell die $\sum_j S_j$ gut approximiert. Stellt V_{approx} also keinen guten Ansatz für die Nucleon-Nucleon-Wechselwirkung dar, ist die Diagonalisierung von (72) nur als Hilfsmittel zur Projektion anzusehen, wobei die Güte wesentlich davon abhängt, wie gut $\left(\sum_j S_j\right)^{approx}$ das Schalenmodellpotential $V_N(\vec{r}_j)$ nähert. Die fraglichen Parameter sind dann so zu nähern , dass die Beziehung

$$\sum_{j=1}^{A} V_N(\vec{r}_j) \simeq \left[\sum_{j=1}^{A} S_j(\vec{r}_j)\right]^{approx}$$

optimal erfüllt ist.

Schliesslich soll noch ein zweiter Ansatz für eine Restwechselwirkung untersucht werden, die Paarwechselwirkung. Dazu benutzt man zweckmässig die Sprache der zweiten Quantisierung.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ifkl} \langle if|\hat{V}|kl\rangle\, a_i^+ a_f^+ a_l a_k \qquad \hat{V} = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \tag{74}$$

$$V_{rest} = \frac{1}{2} \sum_{ifkl} \langle if|\hat{V}|kl\rangle\, a_i^+ a_f^+ a_l a_k - \sum_{if} \Big(\sum_{k<F} \langle ik|\hat{V}|\widetilde{fk}\rangle \Big) a_i^+ a_f \quad ,$$

wobei die Tilde bedeutet, dass auch der Austauschterm zu berücksichtigen ist. F ist die Fermikante. Der zweite Term in (74) ist das mittlere Potential und mit V_S zu identifizieren. Für V_{rest} kann man aber auch direkt ansetzen

$$V_{rest} = \frac{1}{2} \sum_{ifkl} \langle if|\hat{V}_{rest}|kl\rangle\, a_i^+ a_f^+ a_l a_k \qquad \hat{V}_{rest} = \hat{V}_{rest}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad , \tag{75}$$

wobei $\hat{V}_{rest}$ ein geeignetes Potential darstellt, das aber nicht mehr translations und rotationsinvariant ist. Der BCS-Ansatz schreibt nun für (75) vor

$$V'_{rest} = \sum_{k,k'>0} \langle k\,{-k}|\hat{V}|k'\,{-k'}\rangle\, a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k'} a_{k'} \tag{76}$$

oder vereinfacht mit $\langle k\,{-k}|\hat{V}|k'\,{-k'}\rangle \approx -|G|$

$$V_{rest}^{paar} = -|G| \sum_{k,k'>0} a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k'} a_{k'} \qquad , \text{ G = Paarkraftkonstante}$$

Vergleicht man mit (75) und (74), erkennt man, dass (76) den verbliebenen Summenteil des Nucleon-Nucleonpotentials darstellt, der nur die Wechselwirkung zwischen Nucleonenpaaren darstellt. Mit der Hypothese, dass diese gross gegen andere Wechselwirkungsformen ist, stellt also (76) eine gute Näherung für (74) dar. Entscheidend ist, dass für die felderzeugenden Anteile der Nucleon-Nucleon W.W. kein Ansatz gemacht wird (im Gegensatz zur Form (72)) sondern diese

dem Schalenmodellpotential V_S gleichgesetzt werden. Durch Umkehrung von (74) folgt dann ein Ansatz für die Nucleon-Nucleon-Wechselwirkung

$$V \approx V_{approx} = \sum_{k,k'>0} \langle k\,-k|\hat{V}|k'\,-k'\rangle\, a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k'} a_{k'} + \sum_{i,f} \langle i|\hat{V}_S|f\rangle\, a_i^+ a_f \tag{77}$$

$$= -|G| \sum_{k,k'>0} a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k'} a_{k'} + \sum_{i,f} \langle i|\hat{V}_S|f\rangle\, a_i^+ a_f$$

Inwieweit dieser Ansatz realistisch ist, kann nur das Experiment entscheiden. Wenn tatsächlich die Summe aller vernachlässigten Wechselwirkungen der Teilchen untereinander klein gegen V_{approx} ist, dann ist V_{approx} wieder in guter Näherung translations- und rotationsinvariant, so dass man die Projektionswirkung unmittelbar erkennt. Ausserdem erhält man dann ein realistisches physikalisches Ergebnis durch eine Paarkraftrechnung, auch wenn die Ausgangsbasis der Schalenmodellzustände nicht gut war, nimmt man nur genügend Zustände zur Diagonalisierung mit.
(77) hat aber auch dann einen guten Projektionseffekt, wenn V_{approx} zwar V schlecht nähert, aber näherungsweise translations- und rotationsinvariant (z.B. von der Form (72)) ist und - das ist nach oben wichtig - als Feldanteil $\sum_{j=1}^{A} S_j(\vec{r}_j)$ das Schalenmodellpotential liefert.

Dann stellt (77) einen geschickt erratenen Operator dar, der es gestattet, die spuriosen Anteile aus den Vielteilchenwellenfunktionen näherungsweise herauszuprojizieren.

Orientiert man sich mit Paarkraftrechnungen am Experiment, so gelingt es im Mittel ganz gut, experimentelle Niederenergiespektren zu reproduzieren, so dass offensichtlich V_{approx} keinen zu schlechten Ansatz für V darstellt. Unbefriedigend bleibt nur, dass zwar im allgemeinen spuriose Anteile nach oben weggedrückt werden, aber

natürlich im Gesamtspektrum bleiben und auch nicht identifiziert werden können als spuriose Zustände. Man erhält ebenfalls keine Kenntnis über Restspuriositäten (insbesondere im Grundzustand), da (77) sicherlich kein exaktes Projektionsverfahren darstellt und von Kern zu Kern mehr oder weniger gut stimmen wird.

Unter der Annahme, dass die Paarkraft eine gute Projektionswirkung hat, ergeben sich einige interessante Aussagen durch Vergleich mit den Ergebnissen des in dieser Arbeit angewandten, im Prinzip exakten, Projektionsverfahrens spurioser Zustände.

Sieht man sich die Matrixelemente von H_{intr} an, so erkennt man, dass der Grundzustand eines gg-Kernes am stärksten an andere Zustände ankoppelt, d.h. durch Diagonalisierung abgesenkt wird. Es tritt ein zusätzlicher Gap Δ ein, Man kann sich nun leicht überlegen, aufgrund der bekannten Ω - , Paritäts-, und (N,J)-Quantenzahlauswahlregeln der in H_{intr} auftretenden Operatoren, von welchen Grössen Δ abhängt:

$$\Delta = \Delta\left(\varrho(E, P, \Omega, \alpha)\right) \qquad \varrho = \text{Dichtefunktion} \qquad (78)$$

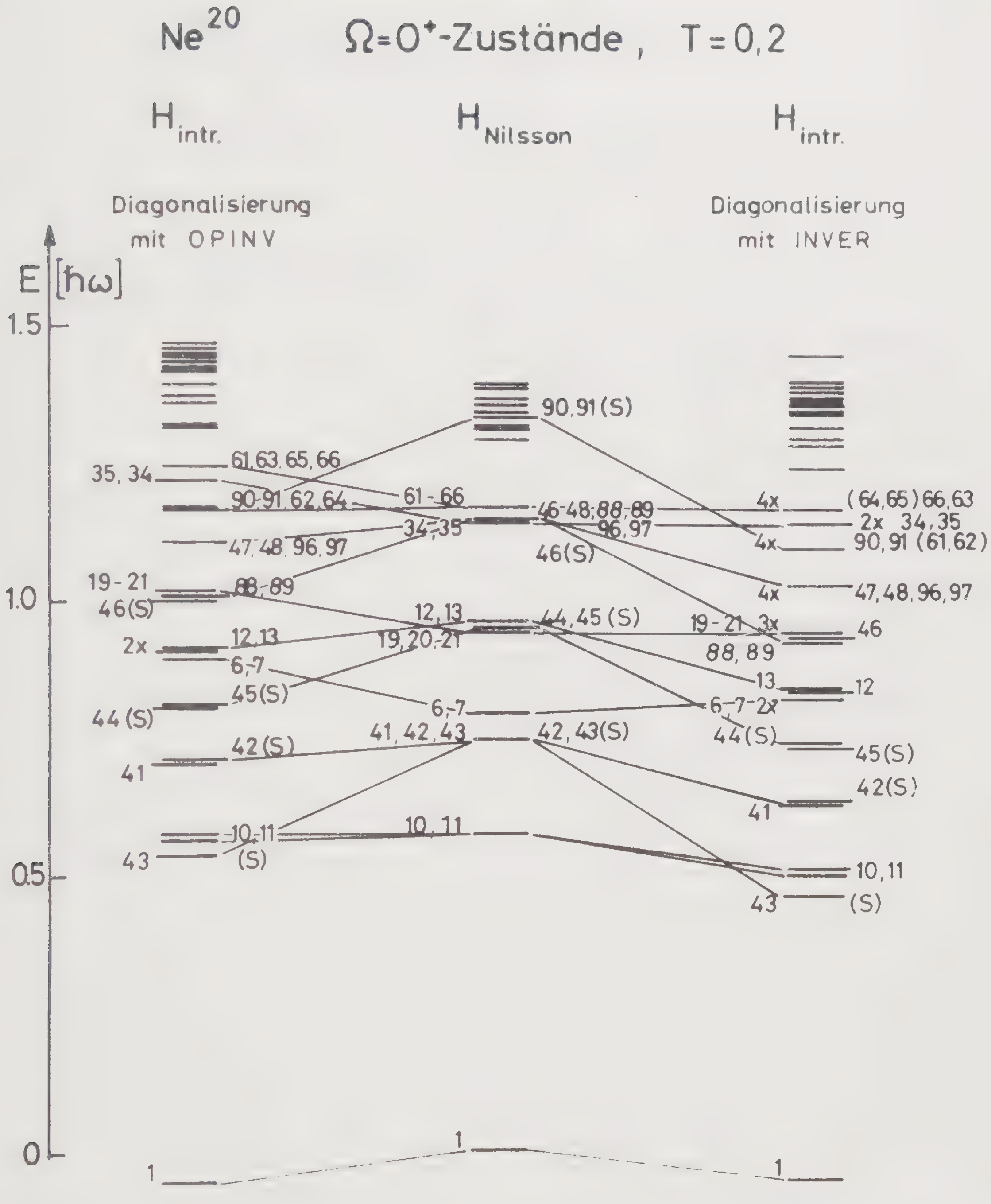
(78) soll bedeuten: Je grösser die Energiedichte, je grösser die Dichte Zustände gleicher Parität und je höher die Dichte der Zustände, die unter Anwendung der Auswahlregeln $\Delta\Omega = 0$; $\Delta N = 0, \pm 2$, $\Delta J = 0, \pm 2 \pm 4$ wesentliche Matrixelemente von H_{intr} liefern, ist, umso grösser wird die Gap in Einheiten von $\hbar\omega_0$ werden. Generell wird Δ zu schweren bzw. stärker deformierten Kernen hin ansteigen in Einheiten von $\hbar\omega_0$, was freilich eine absolute Verringerung in MeV bedeuten kann wegen $\hbar\omega_0 = \frac{41}{A^{1/3}}$. Man erkennt aber auch an (78), dass Schaleneffekte, also die individuellen Strukturen eines Kernes, grossen Einfluss haben können.

Es lässt sich noch eine Aussage über das Verhältnis gg- zu ug-Kernen machen, wenn wir uns den ug-Kern als gg-Core plus 1 Teilchen vor-

stellen mit einfacher jj-Kopplung. Da zur Erstellung nichtspurioser Zustände H_{intr} nunmehr in Zuständen nichtganzzahligen Spins diagonaliert werden muss, wird die in (78) definierte Dichte ϱ reduziert wegen der Ω - und Paritätsauswahlregel. D.h. es gibt

$$\Delta_{gg} > \Delta_{ug}$$

Denselben Effekt zeigen Paarkraftrechnungen, dort genannt "blocking" Effekt.[9]

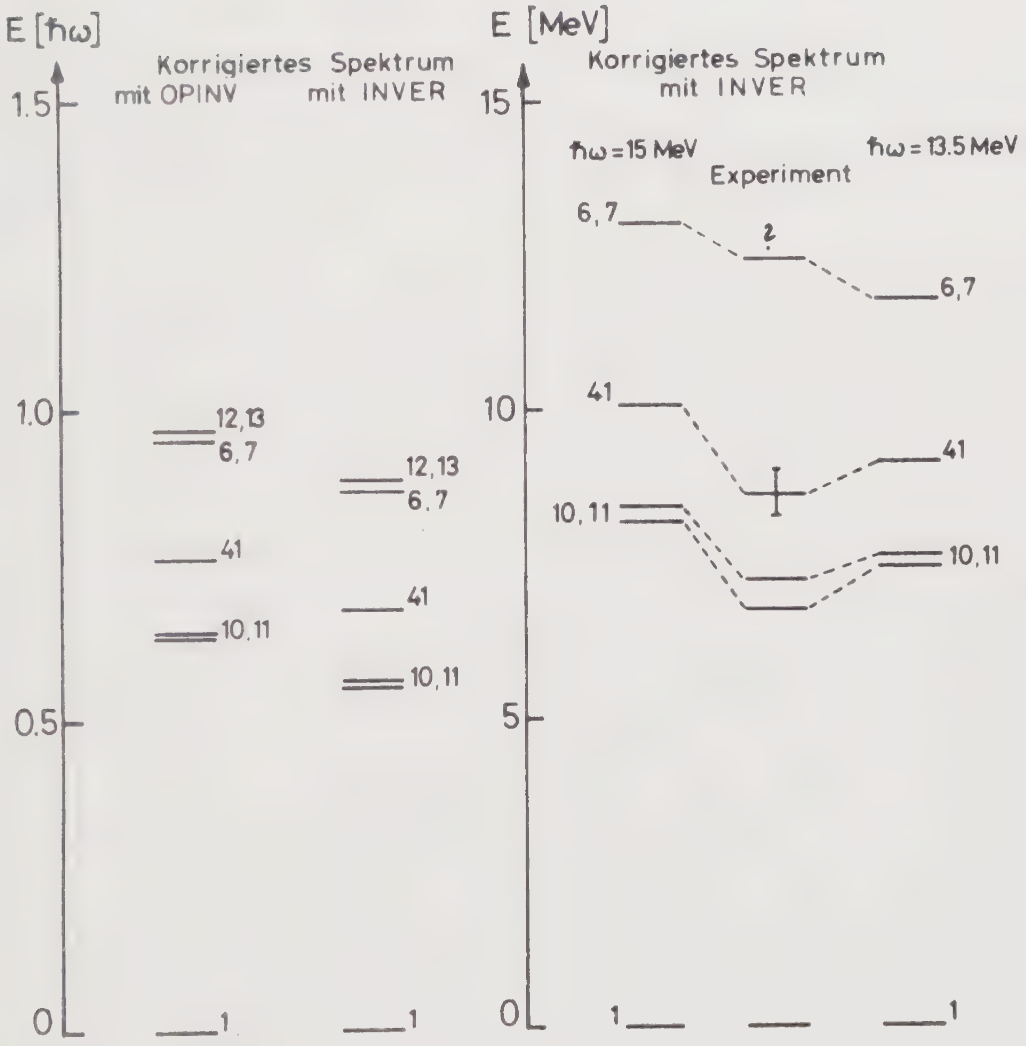


Ne20
Ω=0+-Zustände , T=0,2
H intr.
Diagonalisierung mit OPINV
H Nilsson
H intr.
Diagonalisierung mit INVER
E [ħω]
1.5
1.0
0.5
0

Figur 3

Ne^{20} $\Omega = 0^+$-Zustände $T = 0$

$\delta = 0.4$ $\varkappa = 0.08$ $\mu = 0$



Figur 4

IV. 4 Ein projiziertes $0^{\pm}$ Spektrum von Ne^{20}. Numerische Probleme.

In den Figuren 3 und 4 sind die Ergebnisse zusammengestellt, die man durch Diagonalisierung von H_{intr} erhält. Man erkennt die starke Bewegung spurioser Zustände (siehe dazu Fig.3) nach unten, was man sofort verstehen kann. Denn diese Zustände gehören eigentlich zu $\chi_{K=\pm 1}$ und sind mit $\phi_{\mp 1}(\vartheta_i)$ multipliziert (nach der Zerlegung (64)). Aufgrund der mit $\phi_{\mp 1}(\vartheta_i)$ verbundenen spuriosen Anregungsenergie $\hbar\tilde{\omega} \approx \hbar\omega_0$ liegen diese Zustände deshalb zu hoch und werden durch die Diagonalisierung abgesenkt. Der besonders stark spuriose Zustand (43) erfährt die kräftigste Absenkung.

Bei Anwendung der besonders für den Grundzustand wichtigen verbesserten Näherung für die inversen Operatoren (OPINV) tritt ein zusätzlicher Gap von $\Delta = 0.05\ \hbar\omega_0 = 0.75$ MeV auf. INVER bedeutet die einfachste Näherung der inversen Operatoren nach (52).

Bei Anregungsenergien bis 10 MeV erkennt man im Nilssonspektrum fünf zum Teil entartete Zustände. Von diesen konnten zwei als spurios identifiziert werden (42, 43), wobei dies eine reine Nummerierung ist. Die beiden unteren Zustände (10, 11) spalten auf zu einem Doublett, die Zustände (6, 7), recht reine Zustände nach (Tabelle 4), bleiben liegen und sind weiterhin fast entartet. Der Vergleich mit dem Experiment[10] ist, soweit möglich, in (Fig.4) gezeigt. Die relative Lage der Zustände sowie die nunmehr richtige Anzahl ist erreicht und durch die Wahl eines geeigneten $\hbar\omega_0$ lässt sich das experimentelle Spektrum fast perfekt beschreiben, ohne überhaupt eine Rest-Wechselwirkung zu benutzen und ohne neue Parameter anzupassen. Dieses Ergebnis folgt ganz ausschliesslich aus dem Nilssonmodell als Schalenmodell unter Verwendung des beschriebenen Projektionsverfahrens. Dass die Anregungszustände etwas zu hoch gegenüber dem Experiment liegen, kann neben einer falschen Wahl von $\hbar\omega_0$ noch daran liegen, dass in der Näherung (37), mit der diese Ergebnisse erzielt wurden, die linear in $N_{\alpha\beta}$ gehenden Terme aus (33) vernachlässigt wurden,

die nach den Ausführungen in Anschluss an (67) zu einer Absenkung der Energie bei der doch schon recht grossen Deformation des Ne^{20} $\delta = 0.4$ führen.

Abschliessend seien noch einige numerische Probleme erwähnt, die bei der Berechnung der Eigenwerte und Eigenzustände von H_{intr} auftraten. Einmal musste die Basis sehr gross gewählt werden, damit gewährleistet ist, dass die zueinander spuriosen Zustände wirklich in der Basis vertreten sind. Man muss hier mit Matrixgrössen bis 300x300 rechnen, denn die Ω- Auswahlregeln der in H_{intr} auftretenden Operatoren fordern die gleichzeitige Mitnahme der $\Omega = 0, \pm 2$ Zustände. Es hat sich jedoch gezeigt, dass die $\Omega = \pm 2$ Zustände praktisch nicht mehr an die $\Omega = 0$ Zustände ankoppeln, so dass man sich bei künftigen Rechnung auf eine Ω-Klasse beschränken und dann in der Anregungsenergie höher gehen d.h. mehr Zustände mitnehmen kann. Wie eine Untersuchung der nach (62) explizit über Zwischensummen gerechneten Matrixelemente von $\langle i|\vec{J}^2|i\rangle$ ergab, wird es in einigen Fällen notwendig sein, auch höhere Teilchenhochkonfigurationen mitzunehmen, denn es fehlte Einiges zum direkt gerechneten Wert $\langle i|\vec{J}^4|i\rangle$ bei vielen Zuständen mit höherer Anregungsenergie $(> \hbar\omega_0)$, während die tief liegenden gut reproduziert wurden. Das in (Fig.3, Fig.4) angegebene Spektrum von H_{intr} ist also nur für die untersten Zustände gut glaubhaft. Dort wurde der Vergleich mit dem Experiment vorgenommen.

Zur Bearbeitung dieser Matriz engrössen wurde ein Verfahren benutzt, das sich aus der Eigenschaft der in (37) auftretenden Operatoren ergibt: nur etwa 5% aller Matrixelemente sind betragsmässig grösser $\varepsilon = |\langle \sigma \rangle| \cdot 10^{-4}$. Es wurde deshalb die dichtgespeicherte Matrixform benutzt und alle Matrizenoperationen dahingehend aufgebaut, nur Elemente betragsmässig grösser ε zu verarbeiten. Sei

$$p = \frac{Z}{n^2} \qquad Z = \text{Zahl der } |\langle i|O|f\rangle| > \varepsilon$$
$$n = \text{Matrixgrösse}$$

die Besetzungszahl, dann haben folgende Matrizenoperationen das Verhalten

Addition, Subtraktion, Transposition $\sim$ p

Multiplikation, Inversion (nach 54) $\sim p^2$

Man erkennt unmittelbar die enorme Zeitersparnis, wenn p $\approx$ 5% ist, gegenüber den sonst nötigen Rechenzeiten, wo p durch n^2 ersetzt ist. Dazu kommt der Gewinn an Speicherplatz. Typische Rechenzeiten 1108 Univac 200x200 Matrix $\sim$ 3 Minuten für die gesamte Projektion. Allerdings benötigt der Aufbau der für die Berechnung der Teilchen-Loch-Matrixelemente notwendigen Grundmatrixelemente in Nilssonzuständen, insbesondere die Summen unterhalb der Fermikante, bei einem mittelschweren Kern wie Yb^{168} $\sim$ 30 Minuten.

Zusammenfassung

Die Ausführungen haben gezeigt, welch grosse praktische (IV.1, 2, 4) und theoretische Bedeutung (III.2, IV.3) die Untersuchungen der Rotationsspuriositäten haben. Auch scheint es so zu sein, dass das deformierte Schalenmodell zusammen mit dem Projektionsverfahren zu ebenso guten Ergebnissen führt, wie im sphärischen Fall. Interessant ist ebenfalls, dass die Autoren Ring, Beck, Mang[11] von Variationsansätzen, wie sie in der Hartree-Fock-Theorie angewandt werden, zu Ausdrücken gelangen, die sehr ähnlich solchen sind, die sich bei der Transformation der kinetischen Energie (II, Anhang A1) ergeben. Allerdings gelang es bisher nicht, diesen Termen eine solche anschauliche Bedeutung zu geben, wie es bei dem hier verwendeten Verfahren möglich ist.

Anhang A 1

Definition d. Eulerschen Winkel (ϑ_x, ϑ_y)

1.) Drehung um die x-Achse des Hilfssystems um ϑ_x

2.) Drehung um die neue y'-Achse um ϑ_y

Die Transformation (2o) erhält damit die explizite Gestalt

$$\begin{aligned} x' &= (\bar{x}-\bar{X})\cos\vartheta_y + (\bar{y}-\bar{Y})\sin\vartheta_x\sin\vartheta_y - (\bar{z}-\bar{Z})\cos\vartheta_x\sin\vartheta_y \\ y' &= (\bar{y}-\bar{Y})\cos\vartheta_x + (\bar{z}-\bar{Z})\sin\vartheta_x \\ z' &= (\bar{x}-\bar{X})\sin\vartheta_y - (\bar{y}-\bar{Y})\sin\vartheta_x\cos\vartheta_y + (\bar{z}-\bar{Z})\cos\vartheta_x\cos\vartheta_y \end{aligned} \qquad (A1.1)$$

Definition der Drehimpulsoperatoren

Wie in den Arbeiten von Villars[4)] gezeigt, lässt sich der zur Laborkoordinate $X_{i\alpha}$ kanonisch konjugierte Impuls $P_{i\alpha}$ auf die Form bringen

$$p_{i\alpha} = \frac{1}{A}P_\alpha + \sum_j \frac{\partial\vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}}\Pi_j + \sum_\tau \frac{\partial\xi_\tau}{\partial x_{i\alpha}}\pi_\tau \quad , \quad \alpha = \bar{x},\bar{y},\bar{z}$$

wobei Π_j der kanonisch konjugierte Impuls zu ϑ_j , π_τ von ξ_τ ist.
Die weitere Umformung liefert

$$p_{i\alpha} = \frac{1}{A}P_\alpha + \sum_j \frac{\partial\vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}}\Pi_j + \sum_c R_c p'_{ic} - \sum_c M_{i\alpha,c}L'_c \qquad (A1.2)$$

$$= \frac{1}{A}P_\alpha + \sum_c R_c p'_{ic} + \sum_c M_{i\alpha,c}(L_c - L'_c) \qquad (A1.3)$$

mit $M_{i\alpha,C} = \sum_\gamma \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial x_{i\alpha}} R_{B\gamma}$, den intrinsischen Drehimpulskomponenten

$$L'_C = \sum_{i=1}^{A} (x'_{iA}p'_{iB} - x'_{iB}p'_{iA})$$

und dem auf das intrinsische System bezogenen Gesamtdrehimpuls

$$L_C = \sum_{i=1}^{A} (x'_{iA} p'_{iB} - x'_{iB} p'_{iA}) = \sum_{i,\alpha} (x'_{iA} R_{B\alpha} - x'_{iB} R_{A\alpha}) p_{i\alpha} \qquad (A1.4)$$

Es bedeuten P_{iA} die aufs innere System bezogenen Komponenten des Impulses $P_{i\alpha}$ und P'_{iA} die sogenannten intrinsischen Impulse, nicht zu verwechseln mit den π_τ .

$$p_{iA} = \sum_{\alpha} R_{A\alpha} p_{i\alpha} \qquad , \quad \alpha = \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} \qquad (A1.5)$$

$$p'_{iA} = \sum_{\sigma,\tau} \frac{\partial x'_{iA}}{\partial \xi_\tau} D_{\sigma\tau} \pi_\tau \qquad , \quad D_{\sigma\tau} = \sum_{i,A} \frac{\partial \xi_\sigma}{\partial x'_{iA}} \frac{\partial \xi_\tau}{\partial x'_{iA}}$$

Die $M_{i\alpha,C}$ ergeben sich aus den Nebenbedingungen (21) zusammen mit (A 1.1) wie von B. Fink ausführlich gezeigt[4)]

$$M_{i\alpha,1} = G^{-1}\left\{ (I_3 - I_1)(R_{2\alpha} x'_{i3} + R_{3\alpha} x'_{i2}) + I_{12}(R_{3\alpha} x'_{i1} + R_{1\alpha} x'_{i3}) \right\}$$

$$M_{i\alpha,2} = G^{-1}\left\{ (I_2 - I_3)(R_{3\alpha} x'_{i1} + R_{1\alpha} x'_{i3}) - I_{12}(R_{2\alpha} x'_{i3} + R_{3\alpha} x'_{i2}) \right\} \qquad (A1.6)$$

$$M_{i\alpha,3} = \operatorname{tg} \vartheta_y \; M_{i\alpha,1}$$

mit

$$G = (I_3 - I_1)(I_2 - I_3) + I_{12}^2$$

$$I_A = \sum_i x'^2_{iA} \qquad , \quad I_{AB} = \sum_i x'_{iA} x'_{iB}$$

Setzt man (A 1.2) in (A 1.4) ein und berechnet mittels (A 1.1) die $M_{i\alpha,C}$ explizit, folgt

$$L_1 = \sum_{i,\alpha} (x'_{i2} R_{3\alpha} - x'_{i3} R_{2\alpha}) \sum_j \frac{\partial \vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}} \Pi_j - \operatorname{tg} \vartheta_y \, L'_3$$

$$L_2 = \sum_{i,\alpha} (x'_{i3} R_{1\alpha} - x'_{i1} R_{3\alpha}) \sum_j \frac{\partial \vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}} \Pi_j \qquad (A1.7)$$

$$L_3 = \sum_{i,\alpha} (x'_{i1} R_{2\alpha} - x'_{i2} R_{1\alpha}) \sum_j \frac{\partial \vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}} \Pi_j + L'_3$$

Setzt man (A 1.3) in (A 1.4) für die 3.Komponente ein, so ergibt sich die Operatoridentität

$$L_3 = L_3' \quad ,$$

was das Fehlen des 3. Eulerwinkels beinhaltet und wichtige Konsequenzen hat.

Mittels (A 1.1) lassen sich die $M_{i\alpha,c} = \sum_\gamma \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial x_{i\alpha}} R_{B\gamma}$ berechnen

$$\frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial x_{i\alpha}} = \sum_j \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial \vartheta_j} \frac{\partial \vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}} \text{ , woraus folgt} \tag{A1.8}$$

$$M_{i\alpha,1} = \cos\vartheta_y \frac{\partial \vartheta_x}{\partial x_{i\alpha}} \qquad M_{i\alpha,2} = \frac{\partial \vartheta_y}{\partial x_{i\alpha}}$$

$$M_{i\alpha,3} = \sin\vartheta_y \frac{\partial \vartheta_x}{\partial x_{i\alpha}} = tg\,\vartheta_y M_{i\alpha,1}$$

Daraus lassen sich die $\frac{\partial \vartheta_j}{\partial x_{i\alpha}}$ berechnen und es folgt aus (A 1.7)

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\cos\vartheta_y} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta_x} - tg\,\vartheta_y L_3' \\ L_2 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vartheta_y} \\ L_3 &= L_3' \end{aligned} \tag{A1.9}$$

Das Volumenelement im Eulerwinkelraum ist $d\Omega = |\cos\vartheta_y|\, d\vartheta_x\, d\vartheta_y$.

<u>Wirkung der Drehimpulsoperatoren auf die $R_{AK}(\vartheta_j)$</u>

Mittels (A 1.1) und (A 1.9) folgt unmittelbar

$$\frac{i}{\hbar} L_1 R_{1\gamma} = tg\,\vartheta_y R_{2\gamma} \qquad \frac{i}{\hbar} L_1 R_{2\gamma} = -tg\,\vartheta_y R_{1\gamma} + R_{3\gamma} \qquad \frac{i}{\hbar} L_1 R_{3\gamma} = -R_{2\gamma}$$

$$\frac{i}{\hbar} L_2 R_{1\gamma} = -R_{3\gamma} \qquad \frac{i}{\hbar} L_2 R_{2\gamma} = 0 \qquad \frac{i}{\hbar} L_2 R_{3\gamma} = R_{1\gamma} \tag{A1.10}$$

$$L_3 R_{c\gamma} = 0 \qquad , \; c = 1, 2, 3$$

Daraus resultieren die Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= \frac{\hbar}{i} \left\{ L_3 + tg\, \vartheta_y L_1 \right\} \\ [L_1, L_3] &= [L_2, L_3] = 0 \end{aligned} \qquad (A1.11)$$

Die Natafoperatoren

Schliesslich wollen wir noch einige nützliche Relationen für die Natafoperatoren[12)]

$$\begin{aligned} N_c &= \sum_i \left(x'_{iA} p_{iB} + x'_{iB} p_{iA} \right) = \sum_{i,\alpha} \left(x'_{iA} R_{B\alpha} + x'_{iB} R_{A\alpha} \right) p_{i\alpha} \\ N'_c &= \sum_i \left(x'_{iA} p'_{iB} + x'_{iB} p'_{iA} \right) \end{aligned} \qquad (A1.12)$$

herleiten. Mittels (A 1.3) für $P_{i\alpha}$ eingesetzt folgt

$$N_c = N'_c + \sum_{i,\alpha} \left(x'_{iA} R_{B\alpha} + x'_{iB} R_{A\alpha} \right) \sum_A M_{i\alpha,A} \left(L_A - L'_A \right)$$

Wegen $\sum_i x'_{iA} x'_{iB} = 0$, $(A,B) \neq (1,2)$ folgt nach der Def. (A 1.5) für P'_{iA}

$$\sum_i \left(x'_{iA} p'_{iB} + x'_{iB} p'_{iA} \right) = \sum_i \frac{\partial x'_{iA} x'_{iB}}{\partial \xi_\tau} D_{\tau\sigma} \frac{\partial}{\partial \xi_\sigma} = 0$$

also $N'_1 = N'_2 = 0$ und aus (A 1.12) wegen $L'_3 = L_3$

$N'_3 = N_3$.

Benutzt man (A 1.6) für die $M_{i\alpha,A}$, lässt sich (A 1.12) nach $L_A - L'_A$ auflösen

$$\begin{aligned} L_1 - L'_1 &= G_0^{-1} G \left\{ G_{13} N_1 + 2\, I_{12} I_3 N_2 \right\} \\ L_2 - L'_2 &= G_0^{-1} G \left\{ G_{23} N_2 - 2\, I_{12} I_3 N_1 \right\} \\ L_3 - L'_3 &= 0 \end{aligned} \qquad (A1.13)$$

mit $G_{13} = (I_3+I_1)(I_2-I_3) - I_{12}^2$ $\qquad G_{23} = (I_3-I_1)(I_2+I_3) + I_{12}^2$

$$G = I_{12}^2 - (I_1-I_3)(I_2-I_3)$$

$$G_o = G_{13} G_{23} + 4 I_{12}^2 I_3^2$$

$$(G_o^{-1} G)^{-1} = (I_1+I_3)(I_2+I_3) - I_{12}^2$$

Die Gleichung (A 1.13) ermöglicht es, die L'_c als Funktionen von $L'_c = L'_c(x'_{iA}, P_{iA})$ anstelle der ursprünglichen Darstellung $L'_C(x'_{iA}, P'_{iA})$ anzugeben. Betrachten wir den praktisch wichtigen Fall $I_{12} \approx 0$

ergibt sich

$$L'_1 = \frac{\hbar}{i} \varrho \sum_i (\sigma x'_{i2} p_{i3} - \sigma^{-1} x'_{i3} p_{i2}) \qquad L'_2 = \frac{\hbar}{i} \varrho \sum_i (\sigma^{-1} x'_{i3} p_{i1} - \sigma x'_{i1} p_{i3})$$

mit

$$\varrho = \frac{2\sqrt{I_1 I_3}}{I_1 + I_3} = \frac{2\sqrt{I_2 I_3}}{I_2 + I_3} \quad , \quad \sigma = \sqrt{\frac{I_3}{I_2}} = \sqrt{\frac{I_3}{I_1}} \quad , \qquad (A1.14)$$

wobei diese Schreibweise für die Erwartungswerte zu nehmen ist, da wohl $\langle I_1 \rangle = \langle I_2 \rangle$ aber $I_1 \neq I_2$ als Operatoren. Transformiert man noch auf dimensionslose Koordinaten, ist σ zu ersetzen durch

$$\sigma \longrightarrow \sigma' = \sigma \cdot \sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_x}} = \sigma \cdot \sqrt[4]{\frac{1-\frac{4}{3}\delta}{1+\frac{2}{3}\delta}} \qquad (A1.15)$$

Weitere Beziehungen finden sich in der Arbeit von B.Fink[4)] insbesondere die Vertauschungsrelationen der L'_c, deren Wirkung auf Koordinaten $L'_c\, X'_{jA}$ und abgeleitete Grössen wie I_A, I_{12}, G_{13} usw.

Das Verhalten von L' für $\delta \to \delta_\infty$

Da bei zwei Eulerwinkeln $L_3 = L'_3$ (nach A 1.7) ist, genügt es, L'_1, L'_2 zu untersuchen. Da L'_2 nach (A 1.14) ganz analog L'_1 gebaut ist, wird nur L'_1 exemplarisch untersucht

$$L'_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{2\sqrt{I_1 I_3}}{I_1 + I_3} \sum_i \left(\sqrt{\frac{I_3}{I_1}} \sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_x}}\, x'_{i2}\, p_{i3} - \sqrt{\frac{I_1}{I_3}} \sqrt{\frac{\omega_x}{\omega_z}}\, x'_{i3}\, p_{i2} \right) \qquad (A1.16)$$

Nach A 2.1 folgt

$$\sqrt{\frac{I_3}{I_1}} = \sqrt{\frac{1+\frac{2}{3}\delta}{1-\frac{4}{3}\delta}} \qquad \frac{\sqrt{I_1 I_3}}{I_1 + I_3} = \sqrt{\frac{1-\frac{4}{3}\delta}{1+\frac{2}{3}\delta}}\left(2-\frac{2}{3}\delta\right) \qquad \frac{\omega_z}{\omega_x} = \sqrt{\frac{1-\frac{4}{3}\delta}{1+\frac{2}{3}\delta}}$$

Damit wird

$$L'_1 = \frac{\hbar}{i} 4\left(1-\frac{1}{3}\delta\right) \sum_i \left(\sqrt[4]{\frac{1-\frac{4}{3}\delta}{1+\frac{2}{3}\delta}}\, x'_{i2}\, p_{i3} - \frac{\left(1-\frac{4}{3}\delta\right)^{3/4}}{\left(1+\frac{2}{3}\delta\right)^{3/4}}\, x'_{i3}\, p_{i2} \right)$$

Für $\delta \to \delta_\infty = \frac{3}{4}$ erkennt man, dass $L'_1 \to 0$ geht.

Ableitung der intrinsischen kinetischen Energie T_{in} (33)

Nach (A 1.13) gilt

$$N_1 = \frac{1}{G} \left\{ G_{23} (L_1 - L'_1) - 2 I_{12} I_3 (L_2 - L'_2) \right\}$$

$$N_2 = \frac{1}{G} \left\{ G_{13} (L_2 - L'_2) + 2 I_{12} I_3 (L_1 - L'_1) \right\} \qquad (A1.17)$$

Mittels (A 1.1o) berechnet sich damit

$$\frac{i}{\hbar} N_1 R_{1\alpha} = \frac{1}{G} \left\{ G_{23}\, \mathrm{tg}\, \vartheta_y R_{2\alpha} + 2 I_{12} I_3 R_{3\alpha} \right\}$$

$$\frac{i}{\hbar} N_1 R_{2\alpha} = \frac{1}{G} \left\{ G_{23} \left(-\mathrm{tg}\, \vartheta_y R_{1\alpha} + R_{3\alpha}\right) \right\}$$

$$\frac{i}{\hbar} N_1 R_{3\alpha} = \frac{1}{G} \left\{ - G_{23} R_{2\alpha} - 2 I_{12} I_3 R_{1\beta} \right\}$$

$$\frac{i}{\hbar} N_2 R_{1\alpha} = \frac{1}{G} \left\{ - G_{13} R_{3\alpha} + 2 I_{12} I_3 \, tg \vartheta_y R_{2\alpha} \right\}$$

$$\frac{i}{\hbar} N_2 R_{2\alpha} = \frac{1}{G} \; 2 I_{12} I_3 \left(- tg \vartheta_y R_{1\alpha} + R_{3\alpha} \right)$$

$$\frac{i}{\hbar} N_2 R_{3\alpha} = \frac{1}{G} \left\{ G_{13} R_{1\alpha} - 2 I_{12} I_3 R_{2\alpha} \right\}$$

Berücksichtigt man, dass

$$N_1^2 = N_1 \sum_{\alpha,\beta} R_{2\alpha} R_{3\beta} N_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} + \sum_{\alpha,\beta} (N_1 R_{2\alpha} R_{3\beta}) N_{\alpha\beta}$$

ist, erhält man für die einzelnen Ausdrücke der Form (32) z.B.

$$G_0^{-1} G (I_1 + I_3) N_1^2 = G_0^{-1} G (I_1 + I_3) \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} +$$

$$+ \frac{\hbar}{i} G_0^{-1} (I_1 + I_3) \sum_{\alpha,\beta} \left\{ R_{3\beta} G_{23} \left(- tg \vartheta_y R_{1\alpha} + R_{3\alpha} \right) + R_{2\alpha} \left(- G_{23} R_{2\beta} - 2 I_{12} I_3 R_{1\beta} \right) \right\} N_{\alpha\beta}$$

Fasst man alle Glieder zusammen, erhält man für den letzten Term in (32)

$$G_0^{-1} G \left\{ (I_1 + I_3) N_1^2 + (I_2 + I_3) N_2^2 - I_{12} (N_1 N_2 + N_2 N_1) \right\}$$

$$= G_0^{-1} G \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \left\{ (I_1 + I_3) R_{2\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} + (I_2 + I_3) R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{1\gamma} R_{3\delta} - 2 I_{12} R_{1\alpha} R_{3\beta} R_{2\gamma} R_{3\delta} \right\} N_{\alpha\beta} N_{\gamma\delta} +$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{\hbar}{i} G_0^{-1} \sum_{\alpha,\beta} \Big\{ \left[(I_2 + I_3) G_{13} + 2 I_{12}^2 I_3 \right] \left(R_{1\alpha} R_{1\beta} - R_{3\alpha} R_{3\beta} \right) + \\ &\qquad + \left[(I_1 + I_3) G_{23} - 2 I_{12}^2 I_3 \right] \left(R_{3\alpha} R_{3\beta} - R_{2\alpha} R_{2\beta} \right) - \\ &\qquad - I_{12} \left[2 I_3 (I_1 + I_3) + G_{13} \right] R_{2\alpha} R_{1\beta} + I_{12} \left[-2 I_3 (I_2 + I_3) + G_{23} \right] R_{1\alpha} R_{2\beta} \Big\} N_{\alpha\beta} - \end{aligned} \qquad (A1.18)$$

$$- \frac{\hbar}{i} tg \vartheta_y G_0^{-1} \sum_{\alpha\beta} \left\{ R_{3\beta} R_{1\alpha} \left[G_{23} (I_1 + I_3) - 2 I_{12}^2 I_3 \right] + R_{3\beta} R_{2\alpha} I_{12} \left[G_{23} - 2 I_3 (I_2 + I_3) \right] \right\} N_{\alpha\beta}$$

Nach den Definitionen (A 1.13) lassen sich die Klammerausdrücke zusammenfassen

$$(I_2+I_3)G_{13} + 2I_{12}^2 I_3 = (I_2-I_3)/G_0^{-1}G$$

$$(I_1+I_3)G_{23} - 2I_{12}^2 I_3 = -(I_1-I_3)/G_0^{-1}G$$

$$-\left[2I_3(I_1+I_3)+G_{13}\right] = -1/G_0^{-1}G$$

$$-2I_3(I_2+I_3)+G_{23} = -1/G_0^{-1}G$$

Berücksichtigt man noch, dass $N_{\alpha\beta} = N_{\beta\alpha}$ ist, erhält man durch Indexumdefinition im Ausdruck $\sim I_{12}$ von A 1.18 das Ergebnis (33), wobei sich die Terme in $tg\,\vartheta_y$ gerade gegen die proportional $tg\,\vartheta_y$ in (32) wegheben.

Die Drehimpulsoperatoren im Hilfssystem

Wir wollen zwei nützliche Relationen ableiten.

Aus $\frac{\partial}{\partial\vartheta_j} = \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial\bar{x}_{i\alpha}} \cdot \frac{\partial\bar{x}_{i\alpha}}{\partial\vartheta_j}$ und (A 1.1) nach $\bar{x}_{i\alpha}$ aufgelöst

$$\bar{x}_{i\alpha} = \sum_A R_{\alpha A}\, x'_{iA}(\xi_\nu) + \bar{X}_\alpha \quad , \quad \alpha = 1,2,3$$

folgt

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vartheta_x} = L_x \qquad \text{(A1. 19)}$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vartheta_y} = \cos\vartheta_x L_y + \sin\vartheta_x L_z$$

mit

$$L_\alpha = \frac{\hbar}{i}\sum_i \left(\bar{x}_{i\beta}\frac{\partial}{\partial\bar{x}_{i\gamma}} - \bar{x}_{i\gamma}\frac{\partial}{\partial\bar{x}_{i\beta}}\right) , \quad (\alpha,\beta,\gamma) \text{ zyklisch}$$

Mit Hilfe der Transformationseigenschaft $L_\gamma = \sum_A R_{A\gamma} L_A$ berechnet sich

$$L_z = \sum_A R_{Az} L_A = -\cos\vartheta_x \sin\vartheta_y L_1 + \sin\vartheta_x L_2 + \cos\vartheta_x\cos\vartheta_y L_3$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\cos\vartheta_x\, tg\,\vartheta_y \frac{\partial}{\partial\vartheta_x} + \cos\vartheta_x \sin\vartheta_y\, tg\,\vartheta_y L_3' + \frac{\hbar}{i}\sin\vartheta_x\frac{\partial}{\partial\vartheta_y} + \cos\vartheta_x\cos\vartheta_y L_3' \qquad \text{(A1.20)}$$

$$\approx L_3' + \frac{\hbar}{i}\left(\vartheta_x\frac{\partial}{\partial\vartheta_y} - \vartheta_y\frac{\partial}{\partial\vartheta_x}\right) = L_3' + \mathcal{L}_z(\vartheta)$$

Aus dem Vergleich mit (A 1.19) erkennt man, dass $\mathcal{L}_z(\vartheta) = \frac{\hbar}{i}\left(\vartheta_x \frac{\partial}{\partial\vartheta_y} - \vartheta_y \frac{\partial}{\partial\vartheta_x}\right)$ die 3. Komponente eines "Drehimpulses" im Eulerwinkelraum $\{\vartheta_x, \vartheta_y\}$ darstellt, wobei gilt

$$\mathcal{L}_z \, \phi_{nM}(\vartheta) = M \, \phi_{nM}(\vartheta) \quad . \qquad (A1.21)$$

Anhang A 2

Trägheitsmomente und Deviationsmomente des starren Ellipsoids

$$I_z = \int \rho_0 z^2 dV \qquad I_\rho = \int \rho_0 (x^2+y^2)\, dV \qquad I_{xz}^2 + I_{yz}^2 = \int \rho_0 (x^2+y^2) z^2 dV$$

Die Gleichung des Ellipsoids lautet

$$\omega_x^2 (x^2+y^2) + \omega_z^2 z^2 = R_0^2 \omega_0^2 = \omega_0^2 \left[(1+\tfrac{2}{3}\delta)\, \rho^2 + (1-\tfrac{4}{3}\delta)\, z^2 \right]$$

mit

$$\omega_x^2 = (1+\tfrac{2}{3}\delta)\, \omega_0^2 \qquad \omega_z^2 = (1-\tfrac{4}{3}\delta)\, \omega_0^2$$

Damit wird

$$I_z = \int_0^{2\pi} \int_{z=-R_0/\sqrt{1-\frac{4}{3}\delta}}^{z=R_0/\sqrt{1-\frac{4}{3}\delta}} \int_0^{\rho(z)} \rho_0 z^2\, dz\, d\rho\, \rho\, d\varphi = 4\pi \rho_0 \int_{z=0}^{z=\frac{R_0}{\sqrt{1-\frac{4}{3}\delta}}} \int_0^{\rho(z)} z^2 dz\, d\rho \cdot \rho$$

$$= \frac{2\pi R_0^5 \rho_0}{(1+\frac{2}{3}\delta)(1-\frac{4}{3}\delta)^{3/2}} \cdot \frac{2}{15} \qquad (A2.1)$$

$$I_\rho = \frac{2\pi R_0^5 \rho_0}{(1+\frac{2}{3}\delta)^2 (1-\frac{4}{3}\delta)^{1/2}} \cdot \frac{4}{15}$$

$$I_{xz}^2 + I_{yz}^2 = \frac{2\pi R_0^5 \rho_0}{(1+\frac{2}{3}\delta)^2 (1-\frac{4}{3})^{3/2}} \cdot \frac{8}{105}$$

Daraus berechnet sich mit

$$\rho_0 \cdot V = A \qquad V = \frac{4\pi R_0^3}{3\,(1+\frac{2}{3}\delta)(1-\frac{4}{3}\delta)^{1/2}}$$

$$I_z + I_x = \frac{\rho_0\, 2\pi R_0^5}{(1+\frac{2}{3}\delta)^2 (1-\frac{4}{3}\delta)^{3/2}} \cdot \frac{4}{15} \left(1-\frac{\delta}{3}\right) = \frac{2}{5} A \frac{R_0^2}{(1+\frac{2}{3}\delta)(1-\frac{4}{3}\delta)} \left(1-\frac{\delta}{3}\right)$$

$$I_z - I_x = \frac{\rho_0\, 2\pi R_0^5}{(1+\frac{2}{3}\delta)^2 (1-\frac{4}{3}\delta)^{3/2}} \cdot \frac{4}{15}\delta = \frac{2}{5} A \frac{R_0^2\, \delta}{(1+\frac{2}{3}\delta)(1-\frac{4}{3}\delta)} \qquad (A2.2)$$

$$\frac{I_z - I_x}{I_z + I_x} = \frac{\delta}{1-\frac{1}{3}\delta} \qquad \frac{I_{xz}^2 + I_{yz}^2}{I_z - I_x} = \frac{2 R_0^2}{7\delta}$$

Zusammenhang Quadrupoldeformation und ellipsoidische Deformation

Die Quadrupoloberfläche im intrinsischen Hauptachsensystem wird gegeben durch

$$R_Q = \tilde{R}_0 \left[1 + a_0 Y_{20} + a_2 (Y_{22} + Y_{2-2})\right]$$

$$= \tilde{R}_0 \left[1 + a_0 Y_{20}\right] \quad \text{im axialsymmetrischen Fall.}$$

Eine ellipsoidische hingegen durch (A2.3)

$$R_E = R_0 \left[1 - \frac{2}{3}\delta\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\, Y_{20}\right]^{-1/2}$$

$$= R_0 \left[1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\,\delta Y_{20} + \frac{3}{8}\left(\frac{2}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\right)^2 \delta^2 Y_{20}^2 + \cdots\right]$$

$$= R_0 \left[\left(1 + \frac{3}{2}\,1{,}056^2 \delta^2 \cdot \frac{1}{4\pi}\right) + 1{,}056\,\delta\left(1 + \frac{3}{7}\,1{,}056\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\delta\right) Y_{20} + \cdots\right]$$

$$= \overline{R}_0 \left[1 + \delta\,\frac{1/3\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\left(1 + \frac{2}{7}\delta\right)}{1 + \frac{2}{15}\delta^2}\, Y_{20} + \cdots\right]$$

Die Volumenerhaltung fordert

$$\int_{R_Q} dV = \int_{R_E} dV = \int_{Kugel} dV = \frac{4\pi}{3} R_0'^3 \qquad (A2.4)$$

$$\int_{R_Q} dV = \int_0^{\tilde{R}_0(1+a_0 Y_{20})} dr\, r^2 d\Omega = \left(\frac{4\pi}{3} + a_0^2\right)\tilde{R}_0^3 \qquad \int_{R_E} dV = \frac{\frac{4\pi}{3} R_0^3}{\left(1+\frac{2}{3}\delta\right)\left(1-\frac{4}{3}\delta\right)^{1/2}}$$

woraus folgt

$$R_0 = \left[\frac{\left(1+\frac{2}{3}\delta\right)\left(1-\frac{4}{3}\delta\right)^{1/2}}{1 + 3/4\pi\, a_0^2}\right]^{1/3} \tilde{R}_0 \approx \frac{1 - \frac{2}{9}\delta^2 - \frac{4}{81}\delta^3}{1 + 1/4\pi\, a_0^2}\,\tilde{R}_0 \qquad a_0, \delta \le 0.3$$

Bei $a_0, \delta = 0.3$ ergibt sich $R_0 \approx 0.970\, \tilde{R}_0$ (A2.5)

Für $\overline{R}_0 = \left(1 + \frac{2}{15}\delta^2\right) R_0$ folgt

$$\overline{R}_0 = \left(1 + \frac{2}{15}\delta^2\right)\left[\frac{\left(1+\frac{2}{3}\delta\right)\left(1-\frac{4}{3}\delta\right)^{1/2}}{1 + 3/4\pi\, a_0^2}\right]^{1/3} \tilde{R}_0 \approx 0.981\, \tilde{R}_0$$

Nach (A 2.3) folgt damit

$$a_0 = \left(1+\frac{2}{15}\delta^2\right)\left[\frac{(1+\frac{2}{3}\delta)(1-\frac{4}{3}\delta)^{1/2}}{1+\frac{3}{4\pi}a_0^2}\right]^{1/3}\cdot\delta\cdot\frac{\frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\left(1+\frac{2}{7}\delta\right)}{1+\frac{2}{15}\delta^2} \qquad (A2.6)$$

$$= \frac{1}{3}\frac{\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\,(1+\frac{2}{3}\delta)^{1/3}(1-\frac{4}{3}\delta)^{1/6}}{(1+\frac{3}{4\pi}a_0^2)^{1/3}}\,\delta \approx \frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\cdot 1{,}051\,\delta \quad , \quad a_0,\delta = 0.3$$

abweichend von dem üblicherweise angegebenen Wert

$a_0 = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\,\delta$. Diese Verbesserung wurde erreicht, indem man R_E in (A 2.3) bis zu Gliedern δ^2 entwickelte. (A 2.6) zeigt, dass diese Korrektur nicht vernachlässigbar ist.

Beziehung zwischen Potentialdeformation δ und Massendeformation β

Es gilt nach (A 2.2)

$$\langle I_z - I_x\rangle = \frac{2}{5}A\frac{\langle R_0^2\rangle\,\beta}{(1+\frac{2}{3}\beta)(1-\frac{4}{3}\beta)} \qquad \text{mit } R_0^2 = R_0^2(\beta)$$

$$= \frac{2}{5}A\frac{\langle R_0'^2\rangle\,\beta}{(1+\frac{2}{3}\beta)^{1/3}(1-\frac{4}{3}\beta)^{2/3}} \qquad \text{nach (A2.4)}$$

$A\cdot\langle R_0'^2\rangle$ bestimmt sich aus der Gleichgewichtsdeformation, bei der $\beta_0 = \delta_0$ ist [7])

$$A\cdot\langle R_0'^2\rangle = \frac{\langle I_z - I_x\rangle_{\beta_0}\,(1+\frac{2}{3}\beta_0)^{1/3}(1-\frac{4}{3}\beta_0)^{2/3}}{2/5\;\beta_0}$$

Aus (A 2.6) wird nach β aufgelöst

$$\beta^3\left[32 - \left(\frac{3\,\langle I_z - I_x\rangle_{\beta_0}}{\beta_0\,\langle I_z - I_x\rangle}\right)^3\left(1-2\beta_0+\frac{32}{27}\beta_0^3\right)\right] - 54\beta + 27 = 0 \qquad (A2.7)$$

Werte für Ne^{20}, wobei berechnete Quadrupolmomente zugrunde gelegt wurden und $\beta_0 = \delta_0$ für δ_0 = o,4 angenommen ist .

δ	$\langle I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}} \rangle$	$\bar{\beta}$	Schwankungswinkel $\langle \vartheta^2 \rangle$
- 0.2	- 6,92	- 0.254	$(18{,}7^\circ)^2$ = 0,106
0.0001	3,2	0.943	$(26^\circ)^2$ = 0,211
0.2	11,326	0.278	$(15{,}2^\circ)^2$ = 0,072
0.3	14,94	0.341	$(12{,}5^\circ)^2$ = 0.047
0.4	19,43	0.4	$(10{,}3^\circ)^2$ = 0.033
0.5	25,95	0.468	$(8{,}5^\circ)^2$ = 0.022
0.6	37,74	0.549	$(6{,}5^\circ)^2$ = 0.013

(A2.8)

Berücksichtigt man, dass gilt

$\langle I_{z'} - I_{x'} \rangle \approx \langle I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}} \rangle / (1 - 3\langle \vartheta^2 \rangle)$ kommt man zur folgenden Tabelle für die Deformation der Massenverteilung im inneren System

δ	$\langle I_{z'} - I_{x'} \rangle$	β
- 0.2	- 10,15	- 0.226
0.0001	8,72	0.209
0.2	14,45	0.308
0.3	17,40	0.350
0.4	21,57	0.4
0.5	27,78	0.460
0.6	39,29	0.536

(A2.9)

Literaturverzeichnis

1) G. Höhler et al. Ergebnisse d. exakten Naturwissenschaften Volume 41 (1966)

Inone et al., Nucl. Physics 59,1 (1964)

2) Mayer, Jensen J.Wiley & Sons New York (1967)

Bohr A., Dan. Mat. Fys. Medd. 26 (1952) No. 14

Bohr A., Mottelson B.R., Dan. Mat. Fys. Medd. 27 (1953) No. 16

3) Scheid W. Dissertation, Universität Frankfurt/M. (1967)

Scheid W., Greiner W., Annals of Phys. 48 (1968) 493

4) Villars F., Nucl. Phys. 3 (1957) 24o

Villars F., Annual Rev. of Nucl. Science 7 (1957) 185

Villars F., Annals of Phys. 5 (1958) 224

Villars & Cooper, Annals of Phys. 56 (197o) 224

Fink B., Dissertation Frankfurt/Main (1969)

5) Nilsson S.G., Dan. Mat. Fys. Medd. 29 (1955) No. 16

6) Mosel U., Dissertation Frankfurt/M.

Mosel U., Greiner W. Zeitschrift f. Physik 217 (1968) 256

Mosel U., Greiner W. Zeitschrift f. Physik 222 (1969) 261

7) Kermann A.K., Annals of Physics 12 (1961) 3oo

8) Gillet V., Thesis, Universität Paris (1962)

Gillet V., Nucl. Phys. 51 (1964) 41o

Gillet V., Green A.M., Sanderson E.A., Phys. Lett. 11 (1964) 44

9) G. Baumgärtner / P.Schuch Kernmodelle B.I. 2o2/2o3 a*

Soloview V.G., Mat. Fys. Skrift 1 (1961) No. 11

Nilsson S.G., Prior O., Mat. Fys. Medd. 32 (1961) No. 16

10) Oak Ridge National Lab., Data Summeries 2 (1969)

Lawergren B.T., Ferguson A.T.G., Morrison G.C. Nucl. Phys. A 108 (1968) 325

Adelberger E.G. et al., Nucl. Phys. A 124 (1969) 78

Cerny J., Pehl R.H., Garvey G.T., Phys. Lett. 12 (1964) 234

Halbert E.C., Mc Grory J.B., Wildenthal B.H., Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1112

11) Ring, Beck, Mang, Zeitschrift f. Physik 231 (1970) 10

12) Nataf R., Nucl. Phys. 2 (1957) 497

13) Borse G.J., Lettre Nuovo Cimento 2 (1969) 659

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. W. Greiner, danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und seine stete Bereitschaft zu klärenden Diskussionen, die wesentlich zum Gelingen der Arbeit beitrugen.

Meinen Kollegen, insbesondere Herrn W. Scheid und Herrn B. Fink möchte ich für zahlreiche anregende Erörterungen danken.

Weiterhin gilt mein Dank dem Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt und dem Zentralen Recheninstitut der Universität Frankfurt a.M., die mir in großzügiger Weise Rechenzeit zur Verfügung stellten.

Für die freundliche Mithilfe bei der Fertigstellung der Zeichnungen und des Manuskripts danke ich Frau Utschig und Frau Knolle.

Lebenslauf

Am 2.10.1940 wurde ich in Karlsbad/CSSR als Sohn des Studienrates Dr. Josef Kolb und seiner Ehefrau Annemarie, geb. Ströher, geboren. 1947/48 besuchte ich eine tschechische Dorfschule, bevor ich nach unserer Aussiedlung im Mai 1948 nach Eichelsdorf/Oberhessen in die dortige Volksschule kam. Ab Ostern 1950 besuchte ich das Realgymnasium Nidda. 1954 zogen wir nach Wuppertal-Vohwinkel, wo ich 1960 am dortigen Naturwissenschaftlichen Gymnasium die Reifeprüfung ablegte. Gleich anschließend wurde ich im April 1960 bis 1.1.1962 zum Wehrdienst eingezogen. Im Januar 1962 begann ich mit dem Studium der Physik in Saarbrücken, wo ich im Herbst 1963 die Vordiplomprüfung ablegte. Zum Sommersemester wechselte ich zur Friedrich-Wilhelm Universität Bonn über und nahm dort eine Diplomarbeit bei Prof. Dr. E. Bodenstedt an, die ich im Sommer 1967 mit der Diplomprüfung abschloß. Seit Wintersemester 1964 hatte ich eine halbe Hilfsassistentenstelle inne. Zum Wintersemester 1967 wechselte ich zu Prof. Dr. W. Greiner nach Frankfurt a.M. über, wo ich zunächst ein Stipendium der Stiftung des Volkswagenwerkes erhielt und seit 1.1.1969 Verwalter einer Assistentenstelle bin.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren Maue, v. Fragstein, Dörr, Puppe, Barthel, Söngen, Bodenstedt, Penselin, Mayer-Kuckuck, Rollnik, Greiner, Köthe, Schopper.